

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS

FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

DEPARTAMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Dispersão de Gases Densos na Atmosfera

Autor: Geraldo Luiz Pereira Fontana

Orientador: Rubens Maciel Filho

Dissertação de Mestrado apresentada à
Faculdade de Engenharia Química como
parte dos requisitos para a obtenção do
título de Mestre em Engenharia Química

Campinas – São Paulo

Dezembro - 2004

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

F734d	Fontana, Geraldo Luiz Pereira Dispersão de gases densos na atmosfera / Geraldo Luiz Pereira Fontana.--Campinas, SP: [s.n.], 2006. Orientador: Rubens Maciel Filho Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química. 1. Avaliação de riscos. 2. Gás. 3. Dispersão. 4. Amônia. I. Maciel Filho, Rubens. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. III. Título.
-------	---

Titulo em Inglês: Dispersion of dense gas.

Palavras-chave em Inglês: Risk analysis, Gas, Dispersion, Ammonia.

Área de concentração: Processos químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: Elias Basile Tambourgi e Alexandre Tresmondi.

Data da defesa: 21/12/2004

Dissertação de Mestrado defendida por Geraldo Luiz Pereira Fontana e aprovada em
21 de dezembro de 2004 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho

Prof. Dr. Elias Basile Tambourgi

Prof. Dr. Alexandre Tresmondi

Esta versão corresponde à final da dissertação de mestrado, defendida por Geraldo Luiz Pereira Fontana em 21 de dezembro de 2004

Prof. Dr. Rubens Maciel Filho
orientador

À Maria de Fátima M. Pacheco Fontana
minha esposa

À Geraldo Luiz Pacheco Fontana
meu filho

AGRADECIMENTOS

À Deus, por me ter dado a oportunidade de merecer este caminho.

À meus pais que sempre me orientaram e incentivaram durante todo o momento.

Ao amigo e Prof. Dr. Rubens Maciel Filho pela orientação, compreensão e amizade e por sempre acreditar e incentivar o meu trabalho.

Ao Prof. Luís Fernando Novazzi, pelo apoio e amizade.

Aos professores, funcionários da Fei.

Especialmente a minha esposa e meu filho, pelo amor, dedicação, incentivo e paciência.

RESUMO

Este trabalho descreve alterações significativas do programa computacional, DENZ, o qual é aplicado para o estudo das conseqüências de lançamentos acidentais de grandes quantidades de gases pesados, isto é, gases tóxicos e inflamáveis mais pesados do que o ar. Contém também uma discussão das razões da importância deste estudo e descreve as características e o comportamento dessas substâncias.

Com estas alterações é possível rodar o programa computacional em microcomputadores.

A característica mais importante na dispersão destes gases é o fenômeno do afundamento gravitacional. Esta importante característica pode levar a rápida formação de nuvens tóxicas que podem afetar pessoas que estão nas proximidades ou no sentido do vento.

A segunda e importante característica de dispersão de gás denso é que, quando o afundando termina, a ação da turbulência atmosférica dilui a nuvem de tal modo que a taxa de crescimento da altura de nuvem é consideravelmente pequena, se comparada com uma pluma passiva. Isto significa que, a entrada de ar no cilindro gasoso formado é suprimida na presença de um gradiente de densidade.

Como a nuvem é diluída e mais fresca, as diferenças de temperatura com os arredores são menores e a densidade se aproxima do ar circunvizinho. Desta forma ela pode ser tratada como um gás passivo, e no momento apropriado, pode ser tratada como uma “pluma convencional” que usa modelos padrões de dispersão atmosférica.

A predição correta e o entendimento do fenômeno da dispersão de gases densos representa uma poderosa ferramenta para a tomada de decisões, como também pode ser empregada no treinamento de pessoas em situações emergências nas fábricas.

ABSTRACT

This work describes significant alterations in the computer code, DENZ, which is applied to the study of the consequences of accidentally releasing large quantities of heavy, i.e. heavier than air, toxic or flammable gases to the atmosphere. It also contains a discussion of the reasons why the study of such substances is necessary and describes the characteristic features of their behaviour.

With these alterations it is possible to run the computer code in a microcomputer PC, including the additional graphical facilities as well as a friendly interface.

The most interesting characteristic of the dispersion of such type of gas is the phenomenon of gravitational driven slumping. This important feature can lead to the rapid formation of toxic clouds which may affect people standing close to the release or even upwind.

The second and important feature of dense gas dispersion considered is that, once slumping is terminated, the action of atmospheric turbulence dilutes the cloud in such a way that the rate of growth of the cloud height is considerably smaller than that expected for a passive plume. This means that the entrainment of air is suppressed in the presence of a density gradient.

As the cloud is diluted and becomes warmer, due to heat transfer with the surrounding, its density approaches that of the surrounding air. It becomes increasingly like a passive gas, and, in due course may be treated as a “conventional” plume using standard models of atmospheric dispersion.

The predictions allow the understanding of the dispersion phenomenon on dense gases and represent a powerful tool to take decisions as well as can be employed in personnel training in factory emergency situations.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. OBJETIVO	1
1.2. ORGANIZAÇÃO DA TESE	2
2. AMÔNIA	3
2.1. INTRODUÇÃO	3
2.2. USOS DA AMÔNIA	4
2.3. PROPRIEDADES FÍSICAS	5
2.4. PROPRIEDADES QUÍMICAS	5
2.5. TOXIDADE	5
2.6. LIMITE DE TOLERÂNCIA	7
2.7. ARMAZENAMENTO	10
2.7.1 ARMAZENAMENTO PRESSURIZADO	11
2.7.2 ARMAZENAMENTO A BAIXAS TEMPERATURAS	12
2.7.3 ARMAZENAMENTO SOB O SOLO	12
2.8. CONCLUSÕES	12
3. ANÁLISE HISTÓRICA DE ACIDENTES	13
3.1. INTRODUÇÃO	13
3.2. EXEMPLOS DE ACIDENTES	13
3.3. CONCLUSÕES	17
4. CÓDIGO COMPUTACIONAL	18
4.1. INTRODUÇÃO	18
4.2. IMPORTÂNCIA DO ESTUDO DOS GASES DENSOS	18
4.3. CARACTERÍSTICAS DA DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE GASES DENSOS	20
4.4. MODELO MATEMÁTICO PARA DISPERSÃO DE GASES DENSOS	23
4.4.1. HIPÓTESES	23
4.4.2. AFUNDAMENTO	24
4.4.3. AQUECIMENTO DA NUVEM	25

4.4.4. ENTRADA DE AR	28
4.4.5. TRANSIÇÃO PARA PLUMA PASSIVA	30
4.4.6. CONCENTRAÇÃO DA NUVEM	32
4.4.7. VALIDADE DO MODELO	34
4.4.8. MODELO SIMPLIFICADO	35
4.5. CÁLCULOS REALIZADOS	37
4.5.1. GASES TÓXICOS	38
4.5.2. GASES EXPLOSIVOS	45
4.6. CONCLUSÕES	47
5. ALTERAÇÕES REALIZADAS NO PROGRAMA	48
5.1. INTRODUÇÃO	48
5.2. ALTERAÇÕES REALIZADAS	48
5.3. ENTRADA DE DADOS	49
5.4. RESULTADOS DE SAÍDA	51
5.5. CONCLUSÕES	52
6. APLICAÇÃO DO PROGRAMA	54
6.1. INTRODUÇÃO	54
6.2. CASO 1	54
6.3. COMENTÁRIOS DOS RESULTADOS DO CASO 1	58
6.4. CASO 2	60
6.5. COMENTÁRIOS DOS RESULTADOS DO CASO 2	63
7. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES	65
7.1. CONCLUSÕES	65
7.2. RECOMENDAÇÕES	65
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	66
ANEXO 1: PROGRAMA COMPUTACIONAL WHAZAN	70

LISTA DE TABELAS

Tabela II.1: Propriedades Físicas e químicas da Amônia anidra	4
Tabela II.2: Efeitos fisiológicos da Amônia	6
Tabela VI.1: Efeitos fisiológicos da Amônia	64

LISTAS DE FIGURAS

Figura IV.1: Vazamento de um gás denso	21
Figura IV.2: Tempo de exposição pela concentração média do Cloro	38
Figura IV.3: Definição das direções do vento e da distribuição populacional	44
Figura IV.4: Planilha de entrada de dados	53
Figura VI.1: Altura da nuvem pelo downwind para condição meteorológica F	55
Figura VI.2: Raio pelo downwind para condição meteorológica F	55
Figura VI.3: Concentração pelo tempo para condição meteorológica F	55
Figura VI.4: Concentração pelo downwind para condição meteorológica F	55
Figura VI.5: Crosswind pelo downwind para condição meteorológica F	56
Figura VI.6: Altura da nuvem pelo downwind para condição meteorológica D e 9 m/s	56
Figura VI.7: Raio pelo downwind para condição meteorológica D e 9 m/s	56
Figura VI.8: Concentração pelo tempo para condição meteorológica D e 9 m/s	56
Figura VI.9: Concentração pelo downwind para condição meteorológica D e 9 m/s	56
Figura VI.10: Crosswind pelo downwind para condição meteorológica D e 9 m/s	57
Figura VI.11: Altura da nuvem pelo downwind para condição meteorológica D e 3 m/s	57
Figura VI.12: Raio pelo downwind para condição meteorológica D e 3 m/s	57
Figura VI.13: Concentração pelo tempo para condição meteorológica D e 3 m/s	57
Figura VI.14: Concentração pelo downwind para condição meteorológica D e 3 m/s	57
Figura VI.15: Crosswind pelo downwind para condição meteorológica D e 3 m/s	58
Figura VI.16: Crosswind pelo downwind caso 2, condição meteorológica F	61
Figura VI.17: Crosswind pelo downwind (WHAZAN) caso 2, condição meteorológica F	62
Figura VI.18: Crosswind pelo downwind caso 2, condição meteorológica D	62
Figura VI.19: Crosswind pelo downwind (WHAZAN) caso 2, condição meteorológica D	63

ÍNDICE DAS NOTAÇÕES UTILIZADAS

Símbolo	Significado	Unidade
a	Área da base da pluma	m ²
a'	Área do furo no vaso pressurizado	m ²
A _h	Área de perigo	m ²
A _s	Área da superfície líquida no vaso contendo gás liquefeito	m ²
C _p	Calor específico da mistura a temperatura T	J kg ⁻¹ K ⁻¹
C _a	Calor específico do ar a temperatura T _a	J kg ⁻¹ K ⁻¹
C _g	Calor específico do gás tóxico ou inflamável a temperatura T _g	J kg ⁻¹ K ⁻¹
C*	Coeficiente na parametrização de σ _y , Equação (19)	J kg ⁻¹ K ⁻¹
$\bar{C}_f(\tau)$	Concentração média de vapor tóxico requerido para causar morte no tempo τ	kg m ⁻³
$\bar{C}(\tau)$	Concentração média calculada acima do tempo τ	kg m ⁻³
d	Diâmetro do furo do vaso ou do tubo	m
ent	Índice de critério da entrada	
f	Subscrito que indica quantidades calculadas na temperatura do filme	
f _a	Fração de líquido transportado pelo ar	
f _r	Fator de atrito, Equação (8)	
g	Aceleração da gravidade local	m s ⁻¹
h	Altura da nuvem	m
h _c	Altura ao término do afundamento	m
h _o	Altura inicial da nuvem	m
h _t	Altura da nuvem na transição para passividade	m
int	Intervalo em ln x para cálculo da partida	
k	Constante de Von Karman (~0,4)	
K'	Condutividade térmica da nuvem	W m ⁻¹ K ⁻¹
K	Constante de proporcionalidade na fórmula de Van Ulden, Equação (2)	

Símbolo	Significado	Unidade
l	Comprimento da tubulação	m
l_s	Escala de comprimento da turbulência	m
L	Dimensão típica da nuvem	m
L_f	Limite inferior de inflamabilidade de um gás explosivo	kgm^{-3}
m_a	Massa de ar na nuvem	kg
m_{a0}	Massa de ar inicial na nuvem	kg
m_g	Massa de gás tóxico ou inflamável	kg
N	Número de pessoas sob risco	
Q_c	Taxa de aquecimento da nuvem pelo solo	Wm^{-1}
r_d	Raio máximo de interesse no cálculo	m
R	Raio da nuvem	m
R_0	Raio inicial da nuvem	m
Ri	Número de Richardson	
R_t	Raio da nuvem quando a transição para a passividade ocorre	m
t	Tempo após o início do afundamento	s
T	Temperatura da nuvem	K
T_0	Temperatura inicial da nuvem	K
T_a	Temperatura da atmosfera	K
T_f	Temperatura de filme = $(T_a + T)/2$	K
T_g	Temperatura do solo	K
ΔT_g	$T_g - T$	K
ΔT_a	$T_a - T$	K
$u, u(t)$	Velocidade da nuvem	ms^{-1}
U_e	Velocidade de entrada	ms^{-1}
U_l	Velocidade de turbulência longitudinal	ms^{-1}
V	Volume da nuvem	m^3
V_0	Volume inicial da nuvem	m^3
V_r	Diferença de velocidade	ms^{-1}

Símbolo	Significado	Unidade
x	Distância a favor do vento	m
x_t	Distância em que ocorre a passividade da nuvem	m
x_h	Faixa de perigo	m
x_j	Ponto do j-ésimo ponto de posição	m
$x(t)$	Posição do centro da nuvem no tempo t	m
y	Distância de ascensão da nuvem	m
z	Altura do solo	m
z_r	Altura de referência do vento	m
Z_0	Aspereza meteorológica	m
β	Coeficiente de expansão volumétrica	$m^3 K^{-1}$
ρ	Densidade da nuvem	kgm^{-3}
ρ_0	Densidade inicial da nuvem	kgm^{-3}
ρ_a	Densidade do ar a temperatura ambiente	kgm^{-3}
ρ_g	Densidade do gás tóxico ou inflamável a temperatura ambiente	kgm^{-3}
$\Delta\rho$	$\rho - \rho_a$	kgm^{-3}
$\sigma_x, \sigma_x(x)$	Desvio padrão longitudinal	m
$\sigma_y, \sigma_y(x)$	Desvio padrão lateral	m
$\sigma_z, \sigma_z(x)$	Desvio padrão vertical	m
τ	Tempo de exposição	s
$\tau(x)$	Tempo de exposição no ponto (x,0,0)	s
$\tau(x,y)$	Tempo de exposição no ponto (x,y,0)	s
μ	Viscosidade da nuvem	Pas
χ	Concentração da nuvem	kgm^{-3}

CAPÍTULO I – INTRODUÇÃO

A importância do estudo das consequências causadas devido ao lançamento accidental de grandes quantidades de gases tóxicos ou inflamáveis na atmosfera é inquestionável. Isto é feito através de estudos criteriosos, simulando as condições críticas com modelos matemáticos sofisticados, que sejam os mais realistas possíveis para que se possa prevenir e reduzir o número de acidentes, e com isso evitar inúmeras baixas e consequências negativas para a população.

Estes lançamentos accidentais de grandes quantidades de gases na atmosfera é ainda mais crítico para gases tóxicos ou inflamáveis mais densos que o ar, como é o caso da Amônia. O fato deste gás ser mais denso que o ar dificulta a dispersão da nuvem, além do que, com o vento, este gás se desloca próximo ao solo aumentando desta forma os riscos para a população em geral.

1.1 OBJETIVO

O objetivo deste trabalho é propor alterações no programa computacional DENZ, que apresenta uma modelagem matemática para estudo das consequências causadas devido ao lançamento de gases tóxicos ou inflamáveis, mais densos que o ar, na atmosfera. Estas alterações possibilitarão a utilização desta modelagem matemática em ambiente de micro computadores, já que o programa original só funciona em “main frame”.

1.3 ORGANIZAÇÃO DA TESE

Este trabalho está estruturado em sete capítulos.

Além desta introdução, no Capítulo II é descrita a aplicação, as propriedades físicas, químicas e toxicológicas da Amônia, bem como as formas de armazenamento desta importante substância química. A razão da consideração da Amônia como caso de estudo deve-se ao fato de esta substância é de grande utilização e por gerar gás denso em caso de vazamento.

Uma análise histórica de acidentes de casos de liberação envolvendo a Amônia, é mostrada no Capítulo III, enquanto que no Capítulo IV é descrita a modelagem matemática utilizada no código computacional Denz, assim como as razões da importância deste estudo.

No Capítulo V são descritas as alterações realizadas no programa em estudo, assim como o guia de utilização deste programa.

No capítulo VI são mostrados os casos a serem simulados, sempre comparando os resultados obtidos com um programa de uso comercial ou simulações descritas na literatura.

As discussões, conclusões e propostas de trabalhos futuros são apresentados no Capítulo VII.

No anexo I é apresentada uma breve descrição do Whazan.

CAPITULO II - AMÔNIA

2.1 INTRODUÇÃO

Como exemplo de aplicação do programa desenvolvido, utilizaremos a Amônia por ser um gás, que quando resfriado, apresenta densidade maior do que a densidade do ar. Além deste fato a Amônia também apresenta alta toxicidade, como será visto neste capítulo. A Amônia é utilizada em um grande número de processos da indústria química como matéria-prima, e como gás refrigerante em refrigeradores industriais. Com isso torna-se comum o estoque, transporte e processamento deste gás em grandes centros urbanos, com risco potencial a um grande número de pessoas.

2.2 USOS DA AMÔNIA

A amônia é, uma das matérias primas fundamentais utilizadas na civilização moderna. Somente nos Estados Unidos a produção desta matéria prima excede as 12 milhões de toneladas anuais. O principal uso da amônia é como fonte de nitrogênio para a agricultura (fertilizantes).

Como matéria-prima industrial a amônia é utilizada diretamente na produção de ácido nítrico, o qual é utilizado na produção de polímeros e fibras (nylon, resina uréia – formaldeído, poliuretanas, acrilonitrila e melamina), além do que, é utilizada também na produção de explosivos, hidrazina, aminas, amidas, nitrilas e outros compostos orgânicos nitrogenados que são intermediários para as indústrias farmacêutica e cosmética. Outros produtos inorgânicos importantes obtidos a partir da amônia são o cianeto de sódio e carbonato de sódio.

A amônia também é utilizada na área de proteção ao meio ambiente para a remoção de SO_2 e NO_x de efluentes gasosos provenientes de câmaras de combustão[WAKAYASHI-78][CIT-1979], obtendo-se desta forma o sulfato de amônio ou nitrato de amônio que são utilizados como fertilizantes.

Devido ao seu alto calor de vaporização a amônia tem sido utilizada amplamente como fluido refrigerante, além do que apresenta algumas vantagens em relação a outros fluidos refrigerantes, como por exemplo: ser não corrosivo; e apresentar operação segura; tolerar misturas, resíduos, e contaminações com óleo; e principalmente seu baixo custo [OEZVEGYI-1970][MILLER-1967].

2.3 PROPRIEDADES FÍSICAS

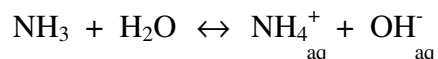
A amônia em temperatura ambiente e pressão atmosférica normal é um gás de baixa densidade, incolor, de cheiro acre e penetrante. Pode ser estocado e transportado como um líquido a alta pressão e temperatura ambiente [WHO-1990]. As propriedades são apresentadas na Tabela II.1

Tabela II. 1: Propriedades físicas da amônia anidra

Massa molecular	17,032
Ponto de ebulição à 101,3 KPa (1atm)	-33,4°C
Ponto de solidificação à 101,3 KPa	-77,7°C
Densidade do líquido no ponto de ebulição à 101,3 KPa	0,682 g/cm ³
Densidade do vapor no ponto de ebulição à 101,3 KPa	8,9.10 ⁻⁴ g/cm ³
Densidade relativa do vapor à 25°C	0,6
Temperatura crítica	133°C
Pressão crítica absoluta	11,4 MPa
Calor latente de vaporização no ponto de ebulição à 101,3 KPa	1371 KJ/kg
Calor de fusão	3,326 KJ/kg
Calor de formação do gás à 25°C, 101,3 KPa	2698, 2 KJ/kg

2.4 PROPRIEDADES QUÍMICAS

Em solução aquosa, o NH_3 se dissocia formando íons amônio (NH_4^+) e hidroxila (OH^-) com os quais estabelece um equilíbrio.



As soluções aquosas de amônia são altamente alcalinas. Quando a amônia líquida é derramada, ela evapora rapidamente, extraindo calor latente de vaporização do ambiente e assim causando queimaduras se espirrado na pele. O NH_3 queima formando óxido de nitrogênio (NO_x) e água.

Não apresenta perigo de inflamabilidade e explosão sob condições normais de operação.

2.5 TOXICIDADE

O gás amônia é extremamente corrosivo e irritante à pele, aos olhos, ao nariz e ao trato respiratório. Exposição por inalação causa irritação do nariz, garganta e membranas mucosas a uma concentração de 130 a 200 ppm, a qual provoca também lacrimação; exposições a 3000 ppm são intoleráveis.

A exposição à altas concentrações (acima de 2500 ppm) ameaçam a vida, tendo como consequências graves danos ao trato respiratório, resultando em bronquites, pneumonias químicas, e edema pulmonar, o que pode ser fatal.

O contato dos olhos com vapor de amônia é extremamente irritante, e exposição dos olhos ao líquido ou mistura (vapor-líquido) pode resultar em lesões permanentes, chegando a cegueira.

A pele em contato com o vapor, mistura e líquido, pode resultar em uma irritação ou queimadura; quando em contato com o líquido causa queimadura criogênica.

Se ingerida no estado líquido queima os tecidos gastrointestinais, provocando dor abdominal intensa, náusea, vômito e colapso, podendo ser fatal.

A amônia não apresenta efeitos carcinogênicos (substâncias que podem causar câncer) ou mutagênicos (substâncias que induzem alterações genéticas no DNA dos cromossomos). A Tabela II.2 apresenta de forma resumida os efeitos fisiológicos da Amônia nas pessoas

Tabela II.2: Efeitos fisiológicos da amônia [AICHE-1986].

Concentração do vapor (ppm)	Efeitos gerais	Período de exposição
25 (MAC)	odor detectável pela maioria das pessoas	máxima para uma jornada de trabalho de 8 horas
100	nenhum efeito adverso para metade dos trabalhadores	não é permitido exposição deliberada por longos períodos
400	imediate irritação do nariz e garganta	nenhum efeito após 0,5 a 1 hora
700	imediate irritação dos olhos	nenhum efeito após 0,5 a 1 hora
1700	tosse, irritação grave dos olhos, nariz e garganta	pode ser fatal depois de 0,5 hora
2400	tosse convulsiva	fatal depois de 30 min de exposição
5000	espasmo respiratório	fatal em minutos
10000	asfixia rápida	fatal

2.6 LIMITES DE TOLERÂNCIA

Denomina-se “Limites de tolerância” àquelas concentrações dos agentes químicos, intensidades dos agentes físicos ou doses de radiação, presentes no ambiente de trabalho ou em uma situação acidental, sob os quais os trabalhadores ou a população podem ficar expostos, sem sofrer efeitos adversos a sua saúde.

Estes limites tem por objetivo garantir a proteção da saúde, mas o seu caráter não é absoluto, refletindo o estado em que se encontra o conhecimento científico em um dado momento, as características do trabalho de cada país, as diferentes maneiras como os limites foram estabelecidos.

Entre os índices conhecidos internacionalmente estão:

- IDHL = “Immediately Dangerous to Life or Health”, adequado para exposições breves de origem acidental;
- TLVs = “Threshold Limit Values”, indicado para exposições prolongadas devido às atividades ocupacionais;
- ERPG = “Emergency Response Planning Guideline”, utilizado para exposições de até 3600s (1 hora).

IDHL

O IDHL, estabelecido pelo “National Institute for Occupational Safety and Health” [AIHA-1989], define a máxima concentração de uma substância no ar, liberada durante um intervalo de 1800 s (30 min), sem que essa liberação cause sintomas que impedem a tomada de decisões de proteção individual ou efeitos irreversíveis à saúde. O IDHL é o valor de referência normalmente utilizado pelas equipes que realizam atendimento de emergência envolvendo substâncias químicas. Os valores propostos pela referência [NIOSH-1985] para IDHL são mais protetivos à saúde que os do “Lethal Concentration to 50 Percent of Exposure Subject” (LD_{50}), utilizado para indicar a toxicidade a curto prazo de uma substância.

TLVs

Os TLVs são índices desenvolvidos pela “American Conference of Governmental Industries Hygienists” [ACGIH-1989] que estabelecem as máximas concentrações de substâncias dispersas no ar em condições sob as quais trabalhadores podem permanecer contínua ou diariamente expostos sem que haja efeitos nocivos à saúde.

Conceitua-se três categorias de TLVs:

- TWA - “Time Weighted Average” (Média ponderada no tempo): concentração média ponderada no tempo de uma substância no ar para uma jornada de trabalho de 8 horas diárias e 40 horas por semana na qual os trabalhadores podem estar expostos continuamente, dia após dia, sem efeitos adversos.
- STEL - “Short-term Exposure Limit” (Limite de exposição de curta duração): concentração média ponderada no tempo de uma substância no ar que limita a exposição a não mais do que 15 minutos (900 s) de cada vez e exige um intervalo de pelo menos 60 minutos (1 hora) entre cada exposição, não podendo ser repetida por mais do que quatro vezes por dia.
- “Ceiling”- C (Limite Teto): concentração de uma substância no ar que não pode ser excedida em nenhuma circunstância durante período de trabalho.

ERPG

Os valores de ERPG foram desenvolvidos pela “American Industrial Hygiene Association” [AIHA-1989] e podem ser utilizados como limites para exposições tóxicas e para planejamento de ações de emergência.

Há três classes de ERPG:

- ERPG-1: máxima concentração de uma substância no ar em que quase todos os indivíduos podem ser expostos por 1 hora (3600 s) sem que ocorram efeitos adversos à saúde mais sérios do que percepção sensorial ou branda irritação.
- ERPG-2: máxima concentração de uma substância no ar em que quase todos os indivíduos podem ser expostos por 1 hora (3600 s) sem desenvolvimento de efeitos irreversíveis à saúde ou sintomas que impedem a tomada de decisões de proteção individual.
- ERPG-3: máxima concentração de uma substância no ar em que quase todos os indivíduos podem ser expostos por 1 hora (3600 s) sem que ocorram efeitos de ameaça à vida.

PEL

“Permissible Exposure Limit” (PEL): limite estabelecido pela “Occupational Safety and Health Administration” (OSHA) e tem por objetivo assegurar a saúde dos trabalhadores expostos a substâncias químicas dispersas no ar. Analogamente aos TLVs, são definidos três categorias: o PEL-TWA (utilizado para exposições por longo período de tempo), PEL-STEL (adequado para exposições contínuas por curto período de tempo, ou seja, 15 minutos) e o PEL-C (usadas para exposições agudas).

A Tabela II.3 apresenta os dados de toxicidade para a Amônia com relação aos índices PEL, ERPG, TLV-TWA e TVA-STEL.

Tabela II.3: Dados de toxicidade para a amônia

PEL (OSHA)	35 ppm	ERPG-1	25 ppm
TLV - TWA (ACGIH)	25 ppm	ERPG-2	200 ppm
TLV - STEL (ACGIH)	35 ppm	ERPG-3	1000 ppm

2.7 ARMAZENAMENTO

Se a produção e o processamento da amônia ocorrem no mesmo local, é necessário a utilização de tanques “pulmão” para evitar flutuações no processo. Caso contrário, ou seja, a produção e a utilização da amônia ocorrem em locais diferentes, deve-se utilizar meios de transporte apropriado. A amônia geralmente é armazenada e transportada na forma líquida [HALE-1979] [HALE-1980].

Preferencialmente, utiliza-se dois métodos para o armazenamento de amônia líquida:

- à temperatura ambiente em vasos pressurizados esféricos ou cilíndricos, com capacidade de no máximo 1.500 toneladas.
- pressão atmosférica a $-33\text{ }^{\circ}\text{C}$ em vasos cilíndricos isolados termicamente com capacidade máxima de 50.000 toneladas.

Um outro método, menos utilizado, é o armazenamento a pressão reduzida e a aproximadamente $0\text{ }^{\circ}\text{C}$, em vasos esféricos isolados termicamente com capacidade de 2.500 toneladas.

Os fatores determinantes para a escolha adequada do tipo de vaso a ser utilizado são a temperatura e as vazões de entrada e saída da amônia.

2.7.1 ARMAZENAMENTO PRESSURIZADO

Este sistema é especialmente indicado para:

- armazenar pequenas quantidades de amônia;
- carregamento e descarregamento de caminhões e navios;
- Entrada e saída de dutos.

Normalmente, os vasos pressurizados cilíndricos são projetados para trabalharem a uma pressão de 2,5 MPa. Os vasos esféricos toleram no máximo 1,6 MPa. Esses vasos são revestidos com material isolante térmico, em regiões de clima quente, para se evitar o aquecimento devido a incidência dos raios solares [HUBNICK-1982].

Para capacidades de armazenamento de até 150 toneladas são utilizados vasos cilíndricos horizontais. Vasos esféricos só são utilizados para capacidades de 250 a 1.500 toneladas.

O principal fator que inviabiliza a construção de vasos pressurizados com grandes capacidades (acima de 2.000 toneladas), é o custo, já que a quantidade de aço utilizada na construção de um vaso deste tipo é aproximadamente 5 vezes maior do que a quantidade utilizada na construção de um vaso, de mesma capacidade, que trabalha a pressão atmosférica e a baixa temperatura. Outro fator importante, é o custo operacional ser também mais elevado, principalmente devido aos gastos com a energia para manter esses vasos pressurizados, quando comparados com os vasos a pressão atmosférica [HALE-1974].

2.7.2 ARMAZENAMENTO A BAIXAS TEMPERATURAS

Modernamente, devido a grande importância da amônia na economia global, a grande maioria das plantas de produção e de consumo da amônia necessitam ter vasos de grande capacidade de armazenamento. Os vasos utilizados nestes casos, como mencionado anteriormente, operam a baixas temperaturas e a pressão atmosférica. Esses vasos são construídos em formato cilíndricos verticais em aço e devem ser isolados termicamente [HALE-1979][HALE-1984]. Como o vaso opera a baixas temperaturas, praticamente não existe problemas de corrosão das paredes do vaso, devido ao ataque pela amônia. Normalmente a pressão de projeto desses vasos são de 10,0 KPa a 15,0 KPa.

2.7.3 ARMAZENAMENTO SOB O SOLO

A amônia é armazenada em cavernas rochosas subterrâneas, por exemplo a empresa Du Pont opera nos Estados Unidos um reservatório, deste tipo, com capacidade de 20.000 toneladas; a empresa Norsk Hydro opera um destes reservatório com capacidade de 50.000 toneladas, na Noruega. O principal problema com esta forma de armazenamento, são as contaminações que a amônia sofre, devido o seu ataque à rocha circundante. Os Russos mostraram grande interesse por esta forma de armazenamento para a amônia utilizada para a produção de fertilizantes [KHARLAMOV-1983].

2.8 CONCLUSÕES

Como verificado neste capítulo a toxicidade elevada da Amônia, e sua utilização intensa, seja como matéria-prima na indústria ou em refrigeradores industriais, obrigam a população a conviver muito próximo desta substância, e é por isto que se deve desenvolver metodologias para que se minimizem os riscos de acidentes, e caso ocorram estes não provoquem muitas baixas na população adjacentes. A finalidade deste trabalho é justamente esta.

CAPÍTULO III – ANÁLISE HISTÓRICA DE ACIDENTES

3.1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo será descrito alguns exemplos de acidentes que ocorreram no passado e que resultaram em um lançamento significativo de Amônia na atmosfera.

3.2 EXEMPLOS DE ACIDENTES

3.2.1 LIBERAÇÃO DE NH_3 ANIDRA DE UM TANQUE DE ESTOCAGEM REFRIGERADA DA “GULF OIL COMPANY”

a) Localização: Blair, Nebraska -EUA

b) Descrição do evento:

- Data: 16/11/70
- Causa: o marcador de nível do tanque não indicou claramente a posição do tubo de descarga. Além disso houve falha concomitante do alarme de nível-alto e do sistema de desativação que não operaram. Isto permitiu que o nível de líquido dentro do tanque subisse até o teto, e deste modo a válvula de descarga abriu.
- Consequência: o tanque foi abastecido além da sua capacidade (40.000 t), o que resultou em transbordamento e consequente liberação de NH_3 anidra para a atmosfera.
- Quantidade liberada: 160 t de amônia.
- Resultado: não houve consequências significativas para esse evento.

3.2.2 VAZAMENTO DE AMÔNIA DO SISTEMA DE OLEODUTO MID-AMERICA NA ESTAÇÃO DE BOMBAS CONWAY

a) Localização: Mc Pherson, Kansas -EUA

b) Descrição dos eventos:

Evento b1:

- Data: 6/12/73
- Causa: aumento de pressão em uma linha, porque a válvula de segurança não abriu.
- Consequência: a linha rompeu-se, causando um grande vazamento de amônia por um período de meia hora.
- Quantidade liberada: foi liberada 230 t de amônia anidra.
- Resultado: não houve consequências significativas para este evento, pois a maioria dos habitantes tinham ido para uma cidade vizinha devido à falta de energia provocada por uma tempestade de gelo, os que estavam à 1,2 km do vazamento e no caminho da nuvem foram retirados seguramente. Dois motoristas de caminhão que passaram pela nuvem ficaram hospitalizados por vários dias, pela inalação do gás tóxico.

Evento b2:

Ocorreu uma outra falha na mesma linha à cerca de 35,4 km da primeira (descrita no evento b1)

- Data: 13/08/79
- Quantidade liberada 360 t de amônia anidra.
- Resultado: novamente não houve nenhuma consequência séria, mas uma grande quantidade de peixes morreu.

3.2.3 LIBERAÇÃO DE AMÔNIA ANIDRA DE UM DOS VASOS DE ESTOCAGEM DA INSTALAÇÃO DE TRIOMF, UMA COMPANHIA DE PROPRIEDADE DOS “AFRICAN EXPLOSIVES AND CHEMICAL INDUSTRIES LTDA”

a) Localização: Potchefstroom, África do Sul

b) Descrição do evento:

- Data: 13/07/73
- Causa: rompimento do fundo do tanque. A falha ocorreu no tanque nº3 enquanto este e o tanque nº4 estavam sendo abastecidos pelo carro tanque. Uma válvula de fluxo existente entre os dois tanques foi acionada e impediu a passagem do líquido para o tanque nº 4.
- Consequência: ruptura repentina do fundo do tanque nº3, com consequente liberação de amônia anidra.
- Quantidade liberada: cerca de 38 t de amônia, sendo 30 t do tanque e 8t do carro tanque.
- Resultado: este acidente fez vítimas fatais tanto dentro quanto fora dos limites da fábrica. Um empregado morreu devido a rajada forte no momento da ruptura e oito morreram tentando escapar num raio de 100m do tanque. Três outros morreram em poucos dias devido a intoxicação. Fora dos limites da fábrica quatro pessoas morreram imediatamente e duas morreram em poucos dias.

3.2.4 TOMBAMENTO DE CAMINHÃO TANQUE CARREGADO DE AMÔNIA ANIDRA PERTENCENTE A “TRANSPORT COMPANY OF TEXAS”

a) Localização: Houston, Texas - EUA

b) Descrição do evento:

- Data: 11/05/76
- Causa: o veículo colidiu e ultrapassou uma defesa numa rampa que fazia ligação entre duas vias expressas.
- Consequência: o tanque que tinha 24.800 litros de amônia anidra rompeu liberando o líquido para a atmosfera.
- Quantidade liberada: toda a carga do tanque.

Resultado: a amônia liberada formou uma névoa a altura inicial de 30m. Estima-se que a amônia evaporou e a nuvem se dissipou em cinco minutos. O motorista do caminhão e outras cinco pessoas morreram, setenta e oito foram hospitalizadas e cerca de outras cem foram feridas.

3.2.5 LIBERAÇÃO E INCÊNDIO DE UM TANQUE DE AMÔNIA REFRIGERADO A PRESSÃO ATMOSFÉRICA

a) Localização: Jonova, Lituânia

b) Descrição do evento:

- Data: 20/03/89
- Causa: devido a um erro de operação, 14 toneladas de amônia aquecida a 10°C foram transferidas para o tanque. A pressão do vapor mais alta do líquido aquecido provocou um aumento repentino de pressão dentro do tanque que a válvula de alívio foi incapaz de controlar.
- Consequência: o tanque rompeu de forma catastrófica, causando tanto uma liberação tóxica e um incêndio com amônia como também um incêndio no estoque de fertilizantes.
- Quantidade liberada: 7.000 t de amônia líquida.
- Resultado: a grande nuvem de amônia e fumos nitrosos espalhou-se por 35 km, cobrindo uma área de 400 km². Cerca de 32.000 pessoas foram retiradas, morreram sete e feriram-se 57 pessoas.

3.3 CONCLUSÕES

Com a descrição destes acidentes procura-se mostrar a importância do desenvolvimento de modelos, que sejam o mais realistas possíveis, que simulem os vazamentos e suas consequências para as pessoas. Com isso as empresas podem tomar as providências necessárias para minimizar ao máximo os efeitos de um acidente com vazamento de gases tóxicos e inflamáveis, como por exemplo a Amônia.

CAPITULO IV – CÓDIGO COMPUTACIONAL

4.1 INTRODUÇÃO

O propósito deste capítulo é descrever a modelagem matemática utilizada no código computacional “DENZ” que é específico para o estudo das conseqüências de lançamentos acidentais de grandes quantidades de gases pesados - isto é, gases mais densos que o ar - gases quimicamente tóxicos ou inflamáveis para a atmosfera. Contém também uma discussão das razões da importância deste estudo e descreve as características e o comportamento dessas substâncias.

4.2 RAZÕES PARA O ESTUDO DOS GASES DENSOS

Sempre existiu um grande interesse e uma preocupação por parte do público sobre os riscos intrínsecos nas atividades associadas com a fabricação, armazenamento e transporte de substâncias químicas potencialmente perigosas. Esta preocupação é devido a ocorrência de vários acidentes durante os últimos anos. Por exemplo, no Reino Unido, ocorreu uma explosão devastadora na planta de Nypro em Flixboroughl [RCIFD-1975]. Um caminhão tanque que transportava Propileno acidentou-se próximo a um acampamento na Espanha [BRISCOE-1978] lançando uma nuvem de vapor que inflamou-se matando mais de cento e cinquenta pessoas. Em novembro 1977, 40 toneladas de amônia foram lançados acidentalmente de um carro tanque pressurizado depois de um descarrilamento de trem em Pensacola, Florida[RAR-1978}, matando duas pessoas e ferindo quarenta e seis.

Nestes, bem como em outros, acidentes, o risco para o público surge devido a lançamentos acidentais de gases tóxicos ou inflamáveis na atmosfera. Provavelmente o caso em que o público em geral está mais exposto a se acidentar é durante a produção, armazenamento e transporte de substâncias químicas pelo escape acidental destas substâncias, o que foi verificado em estudo realizado em um complexo industrial na Ilha de Canvey [CANVEY-1975].

O entendimento da dispersão atmosférica de vapores tóxicos ou explosivos, mais pesados do que o ar, é essencial no estudo de segurança de Plantas Químicas.

Existem gases que são mais densos que o ar devido a suas maiores massas moleculares. Cloro é um exemplo de vapor tóxico denso. A indústria petroquímica produz e transporta um grande número de hidrocarbonetos densos inflamáveis como propano, butano, e propileno. No caso do metano (ou gás natural que consiste em grande parte em metano) é um gás que tem um peso molecular menor que o do ar, mas que devido a sua densidade a baixa temperatura (ponto de ebulição de -161°C) o torna mais denso que o ar. Como o Gás Natural é armazenado ou transportado freqüentemente como um líquido resfriado, o vapor denso pode ser gerado se houver derramamento ou vazamento de Gás Natural Líquido.

Um outro exemplo de um gás que pode, as vezes, formar uma mistura mais densa que o ar é amônia, que é quimicamente tóxica. Ela tem uma massa molecular de dezessete e seu ponto de ebulição é de -33°C , o vapor puro é menos denso que o ar a 20°C . Todavia, há vários exemplos de lançamentos acidentais de amônia de vasos pressurizados nos quais a nuvem de gás resultante era mais densa que o ar [RART-1978][McMULLEN-1976] ou pelo menos não flutuante. A razão para isto é como segue. Se amônia é mantida como um líquido em temperatura ambiente, ela deve estar pressurizada. Se o vaso que contém a amônia sofre uma falha – como o que aconteceu nos E.U.A. em maio de 1976, quando um caminhão tanque caiu de uma seção elevada de uma auto-estrada perto de Houston e explodiu ao cair no solo [McMULLEN-1976] – existe a imediata vaporização de parte do líquido.

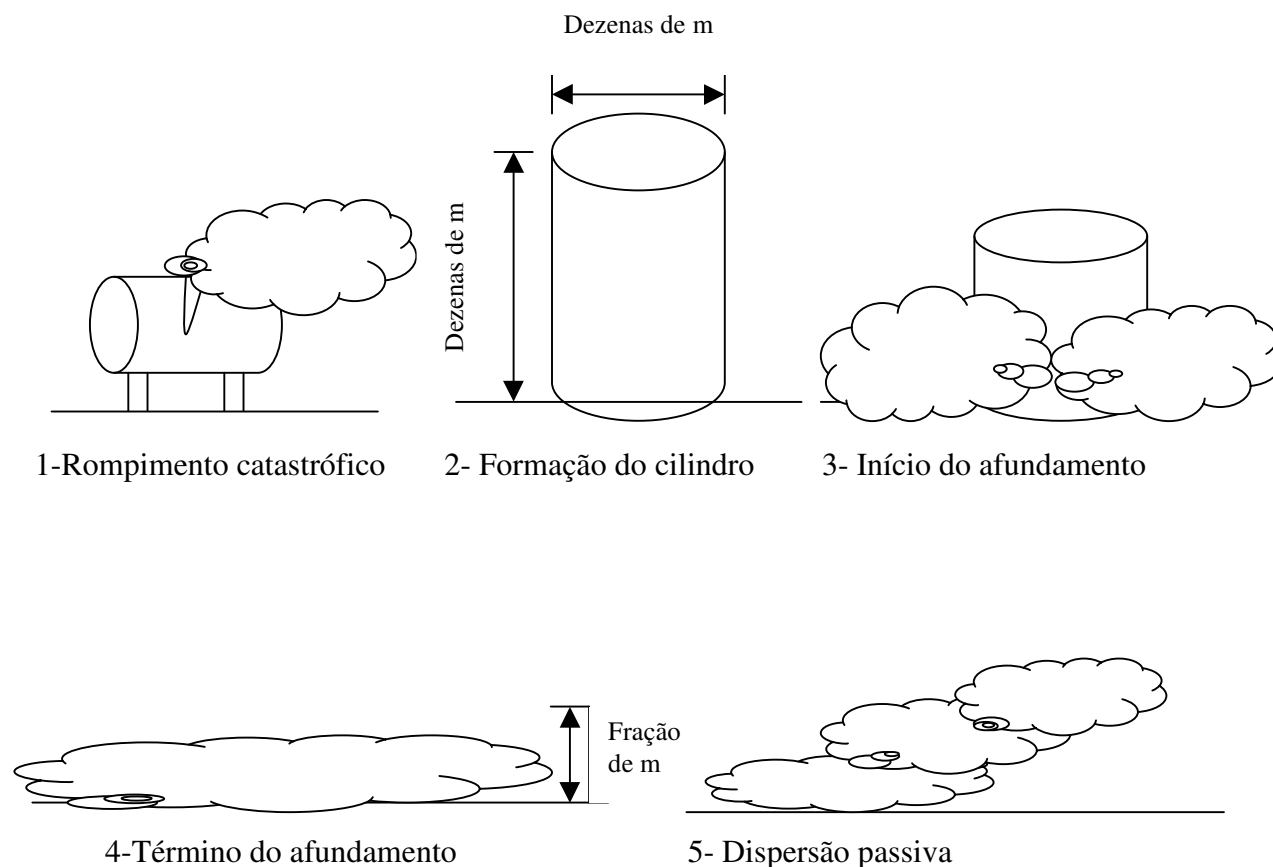
O calor disponível devido ao resfriamento da Amônia até o seu ponto de ebulição é normalmente suficiente para vaporizar aproximadamente vinte por cento de sua massa. A grande quantidade de vapor produzido neste processo de vaporização é tal que grande parte, senão tudo, do líquido restante é lançado no ar como um fino aerossol. Ao mesmo tempo, há entrada de ar que fornece o calor para que a amônia evapore e forme uma mistura de ar e amônia, possivelmente próxima ao ponto de ebulição da amônia. Esta mistura é mais densa que o ar nas vizinhanças [HADDOCK-1978].

4.3 CARACTERÍSTICAS DA DISPERSÃO ATMOSFÉRICA DE “VAPORES PESADOS”

A característica mais interessante da dispersão destes gases é o fenômeno do afundamento gravitacional, que pode ser ilustrado melhor, na Figura IV.1, através de referências e experiências de acidentes atuais.

Na figura V.1 é ilustrado as 5 etapas de um vazamento de gás denso para o ambiente. Em (1) ocorre a ruptura catastrófica do tanque de armazenagem do gás denso. Assim que ocorre esta ruptura do tanque, como o gás armazenado está pressurizado, ocorre grande turbulência arrastando com isso grande quantidade de ar com a formação de um cilindro (2). Este cilindro apresenta uma mistura gasosa, gás denso e ar, que apresenta uma densidade média maior do que a do ar atmosférico. Em (3) ocorre o desabamento, ou afundamento deste cilindro devido a diferença de densidades. O cilindro que possuía dezenas de metros de altura passa a possuir após o afundamento apenas uma fração de metro e ocupando uma área muito extensa (4), é nesta etapa que ocorre o maior risco para a população. Após o afundamento com o aquecimento da mistura gasosa esta se dispersa como se fosse uma nuvem passiva (5).

Figura IV.1: Vazamento de um gás denso



Um exemplo prático mostrado no esquema da Figura IV.1 foi observada quando o Ministério Holandês de Negócios Sociais patrocinou uma experiência na qual 1 Tonelada de refrigerante Freon-12 foi vertido sobre água [HALL-1977]. O processo de ebulição vigoroso subsequente durou aproximadamente cinco segundos durante os quais uma mistura de Freon e ar foi formada na forma aproximada de um cilindro de uns 5-6 metros de altura e 12 metros de raio. Isto implica que o vigor da ebulição era tal que a entrada de ar na nuvem de Freon aumentou de dez vezes seu próprio volume e que a densidade deste cilindro inicial era 1,25 vezes maior que o da atmosfera adjacente. Imediatamente esta nuvem começou a afundar em direção ao solo até ter sua altura diminuída a uma pequena fração de um metro.

Um exemplo notável de um lançamento de amônia de um recipiente pressurizado aconteceu em Pensacola [VAN ULDEN-1977]. Aproximadamente 40 toneladas escaparam rapidamente de um carro tanque e a nuvem foi detectada no radar de um aeroporto próximo, que ficava a favor do vento. Depois de aproximadamente cinco minutos, a nuvem de gás ocupava um diâmetro aproximado de 1 milha.

Os exemplos acima servem para ilustrar que o fenômeno de afundamento é poderosos que pode conduzir à formação rápida de nuvens largas que podem afetar as pessoas que permanecem próximas ou a favor do vento.

Quando o afundando termina, a ação da turbulência atmosférica dilui a nuvem, de tal modo que a taxa de crescimento da altura de nuvem é consideravelmente pequena, quando comparada com o que se espera para uma pluma passiva. Isso é a entrada de ar é suprimida na presença de um gradiente de densidade. Este fenômeno foi ilustrado pelos lançamentos realizados por Porton [PICKNETT-1978]. No item 4.4 este efeito é modelado fazendo-se uma comparação entre a entrada de ar na nuvem com o observado em experiências com túnel de água na qual líquidos de diferentes densidade puderam fluir juntos, já que ambos apresentam o mesmo comportamento de diluição.

Como a entrada de ar ocorre, o vapor pesado é aquecido através da convecção natural e da convecção forçada, se estiver mais frio que seus arredores. Também pode ser aquecido diretamente pelos raios do sol e pode haver reações químicas dentro da nuvem (por exemplo, amônia dissolvida que reage com CO_2 atmosférico) o qual libera calor. A evaporação ou condensação também podem prover fontes de calor. Em princípio, todos estes modos de aquecimento ou resfriamento da nuvem deveriam ser considerados. O modelo desenvolvido neste trabalho, porém, se concentra na convecção natural.

Como a nuvem é diluída e as diferenças de temperatura com os arredores são menores, a densidade se aproxima do ar nas vizinhanças. Desta forma a nuvem pode ser tratada como um gás passivo, e no momento apropriado, pode ser tratada como uma “pluma convencional” que usa modelos padrão de dispersão atmosférica [GIFFORD-1976].

Um modelo matemático da dispersão atmosférica de vapores pesados resfriados é especificados no item 4 deste capítulo e que incorpora as características discutidas até o momento. Antes que seja possível descrever este modelo, é necessário estudar as características de dispersão de gases densos. São mencionados dois exemplos. Em um, a ebulição de Freon-12 em água causou uma entrada de ar vigorosa de cerca de dez vezes seu volume e a formação de um cilindro [VAN ULDEN-1974]. Em outro, o vazamento de um vaso que continha amônia pressurizada causou uma entrada de ar de cerca de dez partes por volume, com isso obteve-se a formação de um pesado cilindro [LONSDALE-1975]. Estes fatos geradores de gases pesados podem ocorrer devido a vazamentos de líquido refrigerado sobre terra ou sobre água, ou de uma variedade de modos nos quais um recipiente pressurizado poderia falhar, ou por outras razões desconhecidas.

4.4 MODELO MATEMÁTICO PARA DISPERSÃO DE VAPORES PESADOS

Como explicado, existe um número considerável de mecanismos pelos quais os vapores densos podem ser lançados na atmosfera e conseqüentemente, há muitas variáveis potenciais, cada qual afetando a dispersão de vapor da atmosfera. Este trabalho, desenvolve-se no contexto do estudo de maior perigo e se preocupa com lançamentos rápidos de grandes quantidades de gases tóxicos ou explosivos na atmosfera.

4.4.1. HIPÓTESE:

Assume-se que o vapor está inicialmente na forma de um cilindro. A razão para se fazer esta suposição, foi devido a observação de testemunhas no acidente de Potchesfstroon [LONSDALE-1975], no qual 30 toneladas de amônia foram lançadas na atmosfera e formaram um cilindro com 150 m de diâmetro e 20 m de altura. O mesmo fenômeno foi observado durante um experimento, realizado na Holanda, na qual 1 tonelada de Freon 12 foi derramado em água [VAN ULDEN-1974]. Ocorreu vaporização vigorosa, e a mistura de vapores originados tinha forma cilíndrica, de 5 a 6 m de altura e volume de 2400 m³.

Aparentemente estas formas cilíndricas são apropriadas para lançamentos repentinos de vasos pressurizados ou quando o líquido refrigerado evapora rapidamente. Assume-se ser possível especificar os parâmetros abaixo:

- (I) a quantidade da entrada de ar durante a formação do cilindro
- (II) a densidade da mistura no cilindro
- (III) a velocidade inicial do cilindro
- (IV) a altura e raio iniciais do cilindro

A determinação das primeiras duas quantidades foi ilustrada por um vazamento catastrófico de amônia de um vaso pressurizado [KAISER-1978]. Desta forma, o vazamento, provoca turbulência, e havendo entrada de ar, é razoável assumir que a nuvem move-se com a mesma velocidade do vento com a metade da altura. A altura inicial pode ser adotada arbitrariamente igual ao raio. A rapidez com que a afundamento gravitacional ocorre, é, a etapa mais crítica.

Fazendo-se uso da velocidade $u(t)$ da nuvem no tempo t [ARTINGSTALL], é dado por:

$$\bar{u}(t) = \bar{u}_w(10) \ln(h/2Z_0) / \ln(10/Z_0) \quad (1)$$

Onde $u_w(t)$ é a velocidade do vento medida a uma altura de 10m, Z_0 é a duração das condições meteorológicas e h é a altura vertical da nuvem.

4.4.2. AFUNDAMENTO

Uma vez formado o cilindro fonte, este começa a afundar como se fosse uma coluna de líquido [VAN ULDEN-1974]. A velocidade da extremidade da nuvem é descrita adequadamente pela analogia de coluna líquida.

$$\frac{dR}{dt} = K \sqrt{\frac{(\rho - \rho_a)gh}{\rho_a}} \quad (2)$$

onde R é o raio, t é o tempo após o início do afundamento; ρ é a densidade da mistura; ρ_a densidade do ar nos arredores; g é a aceleração da gravidade e h é a altura; K é uma constante que tem valor entre um e $\sqrt{2}$. Aplicando-se na equação (2) os teoremas de Bernonelli (46) obtemos $K = \sqrt{2}$, enquanto dados experimentais obtidos por Van Ulden indicam $K=1$ (caso necessário o usuário poderá adotar outro valor). O volume V (o qual não é necessariamente constante) é calculado da equação abaixo:

$$V = \pi R^2 h \quad (3)$$

4.4.3. AQUECIMENTO DA NUVEM

Pode existir uma diferença de temperatura entre o solo e o vapor arrastado pelo ar, para tanto é necessário considerar o mecanismo pelo qual a nuvem pode absorver calor. O calor pode ser absorvido quando ocorre a entrada de ar, a nuvem pode ser aquecida através da convecção natural e através da convecção forçada, se estiver mais frio que seus arredores. Também pode ser aquecido diretamente pelos raios do sol e pode haver reações químicas dentro da nuvem (por exemplo, amônia dissolvida que reage com CO_2 atmosférico) o qual libera calor. A evaporação ou condensação também podem prover fontes de calor. Em princípio, todos estes modos de aquecimento ou resfriamento da nuvem deveriam ser considerados. O modelo desenvolvido neste trabalho, porém, se concentra na convecção natural.

CONVECÇÃO NATURAL

Se a convecção é laminar, a taxa à qual o calor é tomado do solo será:

$$Q_c = \frac{K_f'}{L} A \left[\frac{L^3 \rho_f^2 g \beta_f \Delta T_g}{\mu_f^2} \left(\frac{C_p \mu}{K'} \right)_f \right]^{\frac{1}{4}} \Delta T_g \quad (4)$$

$$Q_c = \frac{K_f'}{L} A Z^{\frac{1}{4}} \Delta T_g^{\frac{5}{4}} \quad (5)$$

onde: C_p é o calor específico da mistura à pressão constante;

ΔT_g é a diferença de temperatura $T_g - T$, onde T é a temperatura da nuvem e T_g é a temperatura do solo;

f é o subscrito que expressa a quantidade medida da temperatura do filme e é dada por $(T + T_g)/2$;

L é a dimensão típica da nuvem;

β é o coeficiente volumétrico de expansão da nuvem;

μ é a viscosidade;

K' é a condutividade térmica da nuvem;

A é uma constante com valor de 0,4175 e é válida para o intervalo $10^5 < Z \Delta T_g < 2 \times 10^7$

Se a convecção é turbulenta e a nuvem é mais fria que o solo, a taxa de aquecimento, é dado por:

$$Q_c = 0,1457 \frac{K_f'}{L} Z^{\frac{1}{3}} \Delta T_g^{\frac{4}{3}} \quad (6)$$

A convecção é turbulenta se:

$$3 \cdot 10^{10} > Z \Delta T_g > 2 \cdot 10^7 \quad (7)$$

CONVECÇÃO FORÇADA

Se a diferença local de velocidade entre a nuvem e o solo é dada por V_r a taxa de aquecimento através da convecção forçada é:

$$Q_c = f_r C_p \rho V_r \Delta T_g \quad (8)$$

onde f_r é o fator de atrito. Esta contribuição foi desprezada neste trabalho.

AQUECIMENTO PELO SOL

Em princípio, a nuvem pode ser aquecida pelo sol, assumindo-se que seja dia. A taxa na qual o calor é absorvido depende dos constituintes da nuvem e de como a radiação é absorvida. Uma mistura de amônia e ar é relativamente transparente ao espectro de radiação solar.

O modelo simplificado, descrito neste trabalho, incorpora o aquecimento pelo solo devido à convecção natural turbulenta e despreza outras fontes de calor. A taxa de aumento da temperatura é dado por:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\alpha (\pi R^2) \Delta T_g^{\frac{4}{3}}}{m_a C_{pa} + m_g C_{pg}} \quad (9)$$

onde os símbolos ainda não definidos estão indicados abaixo:

α é o coeficiente de $\Delta T_g^{\frac{4}{3}}$ na equação (6);

m é a massa;

C_{pa} é o calor específico do ar a pressão constante;

C_{pg} é o calor específico do gás tóxico ou inflamável a pressão constante

4.4.4. ENTRADA DE AR

Na prática, o ar entrará pelas extremidades e topo da nuvem. Pela extremidade durante o afundamento,

$$\frac{dm_a}{dt} = 2\rho_a \pi R h \alpha^* \frac{dR}{dt} \quad (10)$$

onde α^* é uma constante determinada empiricamente. Van Ulden (29) por exemplo, explica que os resultados obtidos por ele, é consistente com $\alpha^*=0$, experimentos realizados em Porton [PICKNETT-1978] na qual aproximadamente 100kg de vapores de freon 12 foram lançados a atmosfera, indicam que α^* é diferente de zero. A magnitude de α^* para grandes escalas permanece incerto. O valor padrão adotado para o cálculo neste trabalho $\alpha^*=0$, entretanto se necessário este valor poderá ser alterado no programa do modelo.

O cálculo da taxa de entrada do ar sobre a superfície do topo ainda não é possível, dado o presente conhecimento teórico, há entretanto, sugestões na literatura. Foi definida uma velocidade de entrada proporcional à diferença local da velocidade acima da superfície do topo. A presença desta diferença indica que é gerada turbulência mecânica. Este mecanismo é importante quando existem grandes diferenças locais de velocidade. Entretanto, se as diferenças de velocidades são pequenas, a turbulência ambiente assume o papel dominante. A velocidade de entrada U_e deve ser dependente do número de Richardson, Ri , mostrado na equação (12) a seguir. Cox e Roe [COX & ROE-1977], sugerem que:

$$U_e = \frac{\alpha' U_1}{Ri} \quad (11)$$

onde:

$$Ri = \left(\frac{g l_s}{U_1^2} \right) \frac{\Delta \rho}{\rho_a} \quad (12)$$

A equação (11) é válida quando $U_e \ll U_1$. U_1 é a velocidade de turbulência longitudinal, que é proporcional à velocidade de fricção u_* , com a constante de proporcionalidade sendo 3,0 (muito instável, categorias meteorológicas de Pasquill A-B), 2,4 (neutro, categorias meteorológicas de Pasquill C-D) ou 1,6 (muito instável, categorias meteorológicas de Pasquill E-F) [VAN ULDEN-1974][PASQUILL-1961]. Estes valores são os adotados e utilizados no programa. α' é a constante de entrada que possui valor padrão igual a 0,5.

Onde l_s , duração da turbulência, é função de h e é fornecido por Taylor et al [TAYLOR-1970], $l_s(h) \propto h^{0.5}$, aplicando-se ao modelo de Cox e Roe, a taxa na qual o ar entra na nuvem é dada por:

$$\frac{dm_a}{dt} = \rho_a (\pi R^2) U_e + 2 \rho_a \pi R h \alpha' \frac{dR}{dt} \quad (13)$$

Ao mesmo tempo, a equação (9) deve ser modificada de forma que:

$$\frac{dT}{dt} = \frac{\frac{dm_a}{dt} C_{pa} \Delta T_a + \alpha (\pi R^2) \Delta T_g^{\frac{4}{3}}}{m_a C_{pa} + m_g C_{pg}} \quad (14)$$

Onde ΔT_g , que é a diferença de temperatura entre o solo e a nuvem, não deve necessariamente ser igual a ΔT_a , que é a diferença de temperatura entre o ar e a nuvem. A taxa de aumento do raio é determinada por :

$$\frac{dR^2}{dt} = 2K \sqrt{\frac{g(\rho_a - \rho)V}{\pi\rho_a}} \quad (15)$$

é similar a equação (2)

São necessários ainda mais duas equações:

$$\rho = \left[\frac{(m_a + m_g)}{(m_a / \rho_a + m_g / \rho_g)} \right] \left(\frac{T_a}{T} \right) \quad (16)$$

e,

$$V = \frac{(m_a + m_g)}{\rho} \quad (17)$$

m_a , t e R^2 são as únicas variáveis independentes nas três equações e podem ser obtidas através da resolução numérica do sistema de equações diferenciais formado pelas equações 13, 14 e 15.

4.4.5 TRANSIÇÃO PARA PLUMA PASSIVA

A modelagem utilizada no programa utiliza dois testes alternativos para que a pluma possa ser considerada passiva. O primeiro teste verifica se ambas as condições são satisfeitas:

(I) O afundamento gravitacional deve causar um aumento do raio que não excede àquele esperado pela turbulência atmosférica sozinha, isto é:

$$\frac{dR}{dt} = K \sqrt{\frac{(\rho_a - \rho)gh}{\rho_a}} < 2,14 \frac{d\sigma_y(x)}{dt} \quad (18)$$

Parametrização convencional da taxa de expansão lateral de uma pluma:

$$\frac{d\sigma_y(x)}{dt} = C^* \frac{dx}{dt} = C^* \bar{u} \quad (19)$$

onde C^* varia de acordo com a classe de estabilidade atmosférica e u é a velocidade da nuvem. C^* apresenta os seguintes valores 0,22; 0,16; 0,11; 0,08; 0,06 e 0,04 nas classes de estabilidade A; B; C; D; E e F, respectivamente.

(II) Como Ri tende a zero, pois na transição para a pluma passiva $\Delta\rho$ tende a zero, U_e deve se tornar igual a U_1 . Como ainda não se determinou a função matemática na qual U_e se aproxima de U_1 , o modelo proposto assume que a equação (11) é aplicada e o teste é realizado para:

$$U_e > U_1 \quad (20)$$

Se as equações (18) e (20) são válidas, a transição é feita para o modelo de pluma passiva.

Entretanto, a diferença de densidade $\Delta\rho$ também é calculada e se for menor que $1,0 \times 10^{-3}$ assume-se que a pluma tornou-se passiva mesmo se as equações (18) e (20) não forem satisfeitas. O valor de $\Delta\rho$ também pode ser alterado pelo usuário.

Apesar das condições acima serem as ideais, elas são plenamente aplicáveis, devido ao fato de não existir um método estabelecido para se determinar efetivamente quando a transição ocorra.

Supondo que a transição ocorra a um ponto x_t a favor do vento e considerando que a altura e o raio são h_t e R_t respectivamente, tem-se que a distribuição de concentração na nuvem é uma Gausiana. Desta forma, os efeitos dos desvios padrões longitudinal (σ_{zt}), lateral (σ_{xt}) e vertical (σ_{yt}) podem ser definidos como segue:

$$\sigma_{zt} = \frac{h_t}{2,14} \quad (21)$$

e

$$\sigma_{xt} = \sigma_{yt} = \frac{R_t}{2,14} \quad (22)$$

A grandes distâncias a favor do vento, as variâncias tornam se:

$$\sigma_z^2(x) = \sigma_{zt}^2 + \sigma_{zh}^2(x - xt) = (h / 2,14)^2 \quad (23)$$

$$\sigma_y^2(x) = \sigma_x^2(x) = \sigma_{yt}^2 + \sigma_{yh}^2(x - xt) = (R / 2,14)^2 \quad (24)$$

onde σ_{zt} e σ_{yt} são funções das classes de estabilidade atmosférica.

4.4.6 CONCENTRAÇÕES NA NUVEM

Se uma quantidade total m_g de material explosivo ou inflamável é lançada, o modelo proposto assume que as concentrações deste material segue uma distribuição Gausiana na nuvem (isso não é logicamente consistente com a utilização da fórmula de afundamento, equação (2), mas com a precisão esperada do modelo, isto não é significativo[KAISER-1978]). No ponto (x,y,z) e a um tempo t a concentração transportada pelo ar é dada por:

$$\chi(x, y, z, t) = \frac{m_g G(x, y, z, t)}{\sqrt{2\pi}^{\frac{3}{2}} \sigma_y^2 \sigma_z} \quad (25)$$

onde

$$G(x, y, z, t) = \exp \left(- \frac{y^2 + (x - x(t))^2}{2\sigma_y^2 - \frac{z^2}{2\sigma_z^2}} \right) \quad (26)$$

e $x(t)$ está na posição central da nuvem a um tempo t

$$x(t) = \int_0^t \bar{u}(t') dt' \quad (27)$$

Os desvios padrões são dados por $\sigma_y = R/2,14$ e $\sigma_z = h/2,14$ para todos os valores de x .

As equações de (1) a (27) são a base da modelagem proposta no programa computacional DENZ. Os cálculos que são realizados por este programa são apresentados a seguir.

4.4.7. VALIDADE DO MODELO

O modelo discutido nesta seção possui as mesmas vantagens dos modelos de outros autores. Estes conduzem às características físicas em poucas e simples equações similares às equações (13) – (17) [RESPLANDY-1969] ou eles utilizam uma análise numérica mais sofisticada. Isto é, os modelos fazem a predição do derramamento de grandes quantidades de gases perigosos (1 – 1000 toneladas), ainda que não estejam disponíveis dados obtidos experimentalmente para comparar-se com o modelo. Como resultado, a predição fornecida por autores diferentes pode variar consideravelmente dependendo do modelo utilizado.

Havens [HAVENS-1977], por exemplo, revisou os métodos para cálculo da conseqüência de vazamentos de 25.000 m³ de gás natural liquefeito em água e encontrou através de predições que a faixa de perigo (que é a distância na qual a nuvem entra em ignição através de uma faísca elétrica ou chama) varia de 1,25 km a 80 km. Existem algumas razões para isto acontecer, mas a mais simples e importante diferença entre os vários modelos está na escolha do mecanismo para a entrada de ar análogo a equação (13).

No modelo proposto, a fórmula de afundamento utilizada na equação (2) é facilmente provada e tem sido utilizada com sucesso na modelagem de vazamentos de aproximadamente 100 kg de freon em água formando uma nuvem de mistura de ar e freon 12 [PICKNETT-1978], e descreve a evolução do vazamento de 1 tonelada de freon 12 conduzida por Van Ulden (29).

A estimativa da taxa de aquecimento de nuvem pelo solo, dado na equação (6), também é uma correlação bem estabelecida [McADAMS-1954]. Não existem detalhes de medida de temperatura com uma grande e fria nuvem de vapor pesado, o qual o modelo poderia ser verificado.

A estimativa da taxa de entrada de ar, equação (13), foi baseada em experimentos na qual um fluido colorido foi injetado em outro mais denso.

Uma vez que o afundamento termina inicia-se o trabalho com a nuvem, estimativas da altura, h , são extremamente influenciadas pelas taxas de entrada de ar. Para 40 toneladas de vazamento de amônia, como mencionado anteriormente (acidente em Pensacola) a altura observada da nuvem quando estava a aproximadamente 1,6 km era 40 metros. Concluiu-se que, dado o presente estado de conhecimento dos experimentos, o modelo pode ser julgado bastante preciso.

O programa foi escrito de maneira que possa ser facilmente utilizado para estimativa de aquecimento da nuvem e entrada de ar. Em princípio, as equações diferenciais devidas a outros fenômenos, a de reações químicas com a nuvem, podem facilmente serem incorporadas.

4.4.8. MODELO SIMPLIFICADO

Nos estágios iniciais do desenvolvimento deste modelo, torna-se aparente que a dispersão atmosférica de uma nuvem contendo vapor pesado, frio, pode convenientemente ser dividida em 4 estágios. Esta divisão em 4 estágios tem sido aplicada com sucesso em experimentos realizados por Van Ulden [VAN ULDEN-1974]

ESTÁGIO 1

Corresponde a formação do cilindro, conforme descrito na seção 4.4.1.

ESTÁGIO 2 - AFUNDAMENTO

Uma vez estabelecido, o cilindro começa o afundamento com uma pequena entrada de ar. O crescimento do raio é descrito pela equação (2). Neste momento, a entrada de ar torna-se importante e a queda deve cessar. Van Ulden [VAN ULDEN-1974] propôs que após o termino do afundamento, são induzidas velocidades de flutuação proporcionais a $\sqrt{\Delta\rho h}$ equação (2) que devem ser comparadas a taxa de dispersão da nuvem devido a ação da turbulência atmosférica, e deve ser proporcional a u_* , a velocidade de atrito (fricção) que é dada pela equação:

$$\bar{u}_w(10) = \frac{u_*}{k} \ln\left(\frac{10}{Z_0}\right) \quad (28)$$

onde k é a constante de Van Karman ($k \sim 0,4$). O critério adotado por Van Ulden para o término do afundamento é :

$$\frac{\Delta \rho g h}{\rho_a u_*^2} = 4 \quad (29)$$

Às vezes, a estimativa pode indicar pequenas alturas de afundamento (fração de metro) e é conveniente introduzir um conceito que ao término do afundamento a altura da nuvem é comparável às características topográficas na superfície – esta altura pode ser escolhida pelo usuário.

ESTÁGIO 3 – NOS ENTORNOS DO SOLO

Na aproximação simplificada, a entrada de ar começa somente após terminado o afundamento. A taxa de aumento na altura é muito menor do que a esperada. Devido a ação do ambiente turbulento, é somente 1/3 do que a esperada na classe F de Pasquill (alta estabilidade) de condições do tempo, entretanto as categorias observadas atualmente durante os experimentos com Freon 12 foi D e E. No modelo original simplificado foi assumido que o aumento na altura é observado, para todas as classes meteorológicas. Deste modo o raio continua a aumentar, de acordo com a equação (2).

ESTÁGIO 4

Quando a diferença de densidade, $\Delta \rho$, é significativamente pequena, todos os efeitos influenciados pela densidade tornam-se desprezíveis e a taxa de crescimento da nuvem é determinada unicamente pela turbulência do ambiente atmosférico. Um modelo convencional de dispersão Gaussiana pode ser utilizado para o cálculo [GIFORD-1976]. O valor de $\Delta \rho = 0,001 \text{ kg/m}^3$ (ou um outro valor definido pelo usuário) define o ponto de transição entre o estágio 3 e o estágio 4.

Esta simplificação do modelo em 4 estágios foi programado no DENZ e pode ser escolhido pelo usuário. Esta divisão em estágios é confiável do ponto de vista qualitativo, visto que estes estágios são bastante utilizados na prática.

4.5 CÁLCULOS REALIZADOS

Neste item, é descrito o caminho pela qual as equações de (1) a (27) são utilizadas no programa computacional, bem com os cálculos que são realizados.

Como qualquer outro programa de computador, o usuário deve fornecer os dados de entrada. Os usuários devem fornecer a massa de gás e a massa de ar que está dentro do cilindro, suas densidades e temperaturas. A taxa de altura, h_0 , o raio, r_0 , também devem ser fornecidos (caso contrário um valor unitário padrão é assumido). Finalmente, o valor da velocidade do vento $\bar{u}_w(10)$ também deve ser fornecido. Na prática, os usuários devem especificar quantas classes meteorológicas diferentes deseja-se utilizar, onde uma condição climática é definida pelo conhecimento da categoria meteorológica e da velocidade do vento.

Padronizando, a faixa de possibilidades de condições meteorológicas são divididas em 7 classes, mas se julgar necessário o usuário poderá definir até 24 pares de classes meteorológicas – velocidade do vento.

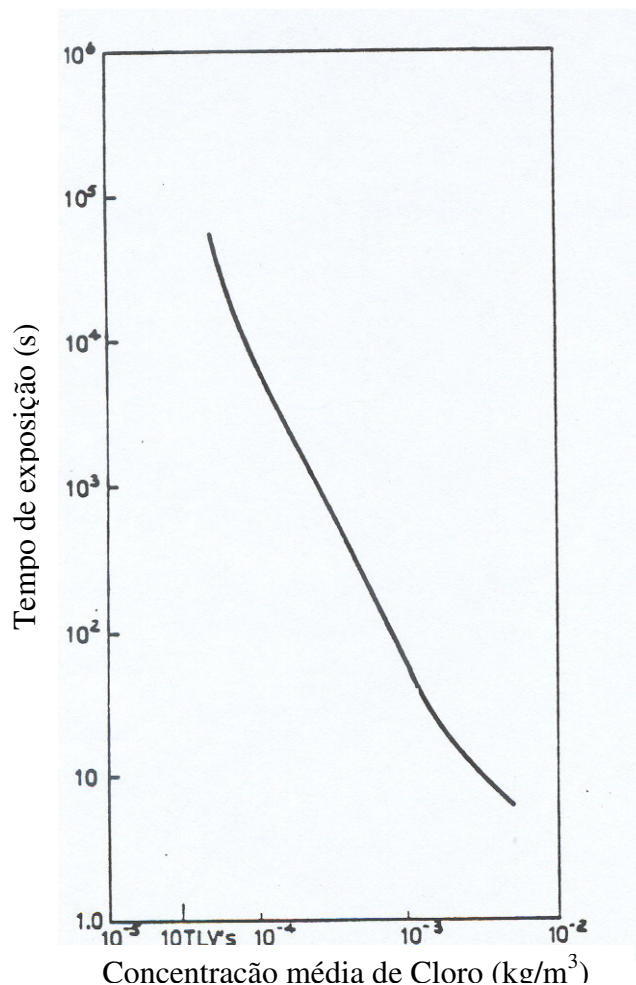
As condições das características da formação do cilindro e meteorológicas possibilitam o início dos cálculos com o programa. Estes cálculos diferem sensivelmente dependendo se o caso considerado é devido a um gás tóxico ou um gás explosivo.

4.5.1. GASES TÓXICOS

CÁLCULOS APROXIMADOS

A concentração média $\bar{C}_f(\tau)$ requerida para matar uma pessoa é em geral, uma função complicada do tempo de exposição (6). O mesmo é correto, dizer dos níveis médios da concentração requerida para produzir outros efeitos mais sérios que irritações ou queimaduras. Na figura IV.2 [FRYER & KAISER-1979], é mostrado como o tempo de exposição letal, τ , para o cloro varia com a concentração média $\bar{C}(\tau)$.

Figura IV.2: Tempo de exposição x Concentração média de Cloro



A figura IV.2 pode ser descrita pela equação [PASQUILL-1961].

$$\tau [\overline{C}_f(\tau)]^{-2,3} = \text{constante} \quad (30)$$

o usuário deve fornecer os dados de $\overline{C}(\tau)$ versus τ como uma tabela de números para interpretação.

Se \bar{u} e σ_y não variam muito pela passagem da nuvem através de um observador ao nível do solo (x, y, 0) as quantidades τ e $\overline{C}(\tau)$ podem facilmente ser calculadas pela equação:

$$\tau(x) = \frac{4,28\sigma_y(x)}{\bar{u}} \quad (31)$$

com

$$\overline{C}(\tau(x), y) = \frac{m_g \exp\left(-\frac{y^2}{2\sigma_y^2}\right)}{4,28\pi\sigma_y^2\sigma_z} \quad (32)$$

Estas quantidades são calculadas pelo programa como uma função da distância a favor do vento. Para limitar o número de cálculos requeridos eles são divididos como a seguir. Suponha que a faixa máxima na qual o usuário se interessa é r_d (o qual ele fornece ou tem como valor padrão 10km) então esta faixa é dividida em 48 intervalos igualmente espaçados dado por:

$$\text{int} = 1,5 \left(\frac{\ln r_d}{49} \right) \quad (33)$$

Onde o fator 1,5 é escolhido arbitrariamente de forma que o valor obtido seja bem próximo do valor real . A posição do j ésimo termo na posição é

$$x_j = \exp[(j-1)\text{int}] \quad (34)$$

com

$$x_1 = 1 \text{ metro} \quad (35)$$

então o programa calcula a seguir e imprime as quantidade de cada valor j, x_j , $R, \tau(x_j)$, $\bar{C}(\tau(x_j), 0)$ e $t(x_j)$, onde $t(x_j)$ é o tempo para reagir x_j , imprime também a temperatura T, a densidade média ρ , a diferença de densidade $\Delta\rho$, a taxa na qual o calor está sendo trocado através da base da nuvem, a massa de ar na nuvem m_a , a velocidade de entrada U_e , e o número de Richardson, Ri, das equações (11) e (12).

Para cada ponto de posição o valor calculado de $\bar{C}(\tau(x_j), 0)$ é comparado com a informação lida sobre o valor de \bar{C} requerida para causar a morte, ou qualquer outra consequência que tenha sido considerada $\bar{C}(\tau(x_j))$.

Quando $\bar{C}(\tau(x_j), 0)$ torna-se menor que $\bar{C}(\tau(x_j))$ os valores dos \bar{C} são interpolados linearmente entre aquele ponto e o ponto anterior para obter uma estimativa aproximada da faixa de perigo, x_h .

Se este valor de x_h , torna-se o valor x_n , então todos os pontos de posição na origem da quantidade y_j são calculados, pela equação:

$$\bar{C}_f(\tau(x_j)) = \bar{C}_f(\tau(x_j), 0) e^{-\frac{y_j^2}{2\sigma^2(x_j)}} \quad (36)$$

Uma estimativa da área em que as concentrações de gás estão acima do nível é dado por:

$$A_h = \sum_{j=1}^{n-1} (x_{j+1} - x_j) (y_{j+1} + y_j) + y_n (x_h - x_n) \quad (37)$$

Se estas estimativas são consideradas com precisão suficiente, os cálculos podem ser finalizados neste ponto e este programa provará ser o mais econômico em termos de tempo de execução computado. Se a precisão requerida é grande, o programa utilizará métodos de cálculo mais sofisticados.

CÁLCULO PRECISO DE FAIXAS E ÁREAS

O programa calcula numericamente $\bar{C}(\tau_j)$ e $\bar{C}(\tau(x_j), 0)$ a cada ponto de posição a favor do vento sem assumir (como na equação 32) que σ_y e \bar{u} não sofre alterações com a passagem da nuvem, e desta forma é determinado o pequeno valor de x_j na qual $\bar{C}(\tau(x_j), 0)$ é menor que $\bar{C}(\tau(x_j))$. A faixa de perigo, x_h , é então determinada pelo valor de $\bar{C}(\tau(x'), 0)$ nos pontos entre x_j e x_{j-1} , e define-se o valor de x' , $(x_{j-1} \leq x' \leq x_j)$, de modo que:

$$\bar{C}(\tau(x'), 0) < \bar{C}_f(\tau(x'))$$

e

$$\bar{C}(\tau(x'-10), 0) \geq \bar{C}_f(\tau(x'-10)) \quad (38)$$

por exemplo, o valor x_h é determinado para 10 metros.

Valores de $\bar{C}(\tau(x'),0)$ são encontrados utilizando interpolação logarítmica entre os valores das concentrações e o raio da nuvem nos pontos de posição j ésimo e $(j - 1)$ ésimo.

Um cálculo similar é utilizado para determinar as faixas de perigo durante o movimento ascendente da nuvem.

As regiões a favor do vento onde podem ocorrer concentrações perigosas são encontradas determinando-se a distância da propagação lateral, y_j , em cada ponto de posição, as quais as expressões abaixo são válidas:

$$\bar{C}(\tau(x_j), y_j) < \bar{C}_f(\tau(x_j), y_j)$$

e

$$\bar{C}(\tau(x_j), y_j - 10) \geq \bar{C}_f(\tau(x_j), y_j) \quad (39)$$

onde $\bar{C}_f(\tau(x_j), y_j)$ é a concentração média considerando perigo se houver inalação acima de um período igual ou maior que a duração da passagem da nuvem no ponto (x_j, y_j) . O resultado desta equação é determinado pela estimativa da diferença do tempo de chegada e o tempo de partida da nuvem, novamente fazendo considerações sobre σ_y e \bar{u} durante a passagem da nuvem. O período da passagem da nuvem fora do eixo não é a mesma no eixo do desenvolvimento de modo que o método descrito aqui é um refinamento do que é usado na equação (36).

A área de perigo a favor do vento é então calculada utilizando-se a equação (37).

Um cálculo similar é utilizado para se determinar a área de perigo quando ocorre a ascensão da nuvem.

INTERAÇÃO COM POPULAÇÃO

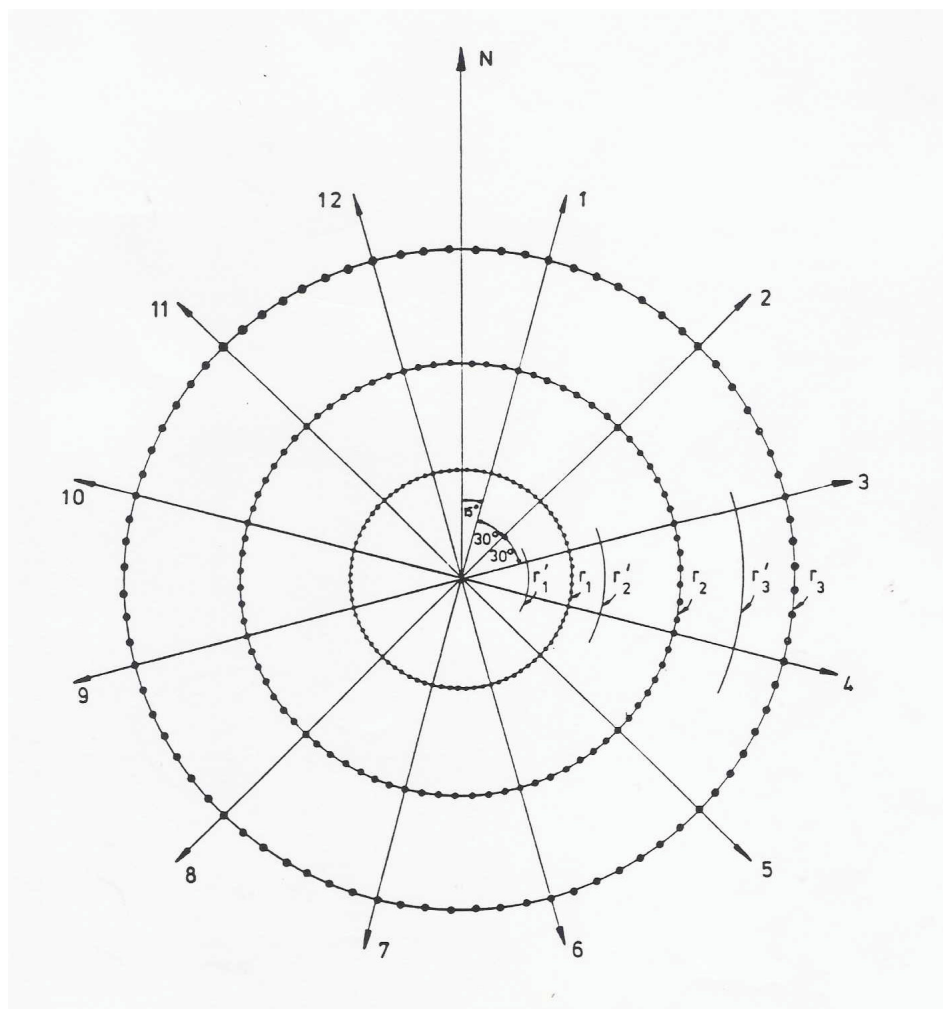
O cenário descrito até o momento facilita o usuário para determinar o número de classes meteorológicas, e se existe ou não níveis de perigo em algum ponto. Para o cálculo do efeito nos arredores da população é necessário fornecer dados simplificados da população e dados meteorológicos.

São definidos 12 setores; o primeiro de $0 - 30^\circ$; o segundo de $30 - 60^\circ$ e assim por diante, como mostrado na figura IV.2. Se de onde o vento sopra é considerado o eixo, isto é, supõe-se que há 12 direções de vento ao longo das linhas designadas 1,2,3....12. Dos dados obtidos estatisticamente e do tempo calculado pela estação meteorológica é possível compilar uma tabela de distribuição de possibilidades de setor em que o vento se desloca, a classe meteorológica de pasquill e a velocidade $p(i, CAT, u)$ onde i especifica o setor o qual o vento se desloca, CAT é o tipo de classe meteorológica e $u = \bar{u}_w(10)$.

Os dados de população são simplificados como se segue. Os usuários podem escolher raios $r_1', r_2', r_3' \dots$ até um máximo de r_m' para cada um dos 12 setores de 30° , todas as pessoas que vivem entre r_1' e r_2' são transferidas para um raio $r_1 = (r_1' + r_2')/2$; do mesmo modo, temos para $r_2 = (r_2' + r_3')/2$, e assim por diante até $r_d = (r_{m-1}' + r_m')$. Considera-se que as pessoas que estivessem em um raio e setor são dispostas uniformemente através de um arco, ou mais precisamente são dispostas em sete pontos através de um setor de 30° , totalizando $12 \times 7 = 84$ pontos igualmente espaçados no círculo r_3 . Todos os outros círculos r_1, r_2, \dots, r_d são divididos similarmente como mostrado na Figura IV.3.

Suponha agora que o vento sopra no setor 1. O programa começa a calcular com r_1 e move-se ao redor de todos os 84 pontos de população, determinado para cada um, dentro ou fora da nuvem, quais as dosagem das substâncias no ar que estão acima do nível de perigo. Para pequenos raios e grandes afundamentos da nuvem, todos os pontos do círculo podem em princípio ser afetados. O processo é repetido para todos os raios, e o número de pessoas sob risco num vazamento é calculado.

Figura IV.3: Definição das direções do vento e da distribuição populacional



O cálculo pode ser repetido para outros setores e para todas as classes meteorológicas definidas na entrada do programa. Em outras palavras, associado com cada probabilidade condicional $p(i, CAT, \bar{u}_w)$ há um número $N(i, CAT, \bar{u}_w)$ de pessoas sob risco de morte, ou de queimaduras ou de outras conseqüências específicas. O programa organiza este número de valores crescentes de N e probabilidade acumulada dando $P_c - N$ linhas, as quais podem ser plotadas em função da probabilidade P_c . Se a frequência, f , com a qual os vazamentos ocorrem naquele local foi calculada o $P_c - N$ linhas pode ser convertido no chamado $f - N$ linhas que é um meio mais conveniente para estimar-se o risco social.

4.5.2. GASES EXPLOSIVOS

O usuário do programa pode fornecer certos níveis de perigo. A modelagem matemática aplicada aqui não trata gases explosivos da mesma forma que gases tóxicos.

CÁLCULOS APROXIMADOS

No tempo t o centro da nuvem está posicionada a uma posição $x(t)$, movendo-se com velocidade $u(t)$. A concentração da nuvem na linha central é:

$$\chi(x(t),0,0,t) = \frac{m_g}{\sqrt{2\pi}^{\frac{3}{2}} \sigma_y^2 \sigma_z} \quad (40)$$

O programa trabalha sobre $\chi(x(t),0,0,t)$ e, se o n éximo ponto de posição é o primeiro que cai abaixo de L_f , interpola-se linearmente entre x_n e x_{n-1} para resolver a equação na faixa de perigo x_h .

$$\chi(x_h,0,0,t(x_h)) = L_f \quad (41)$$

Para cada ponto de posição calculado, obtem-se a equação:

$$\chi(x_j, y_j, 0, t(x_j)) = L_f \quad (42)$$

é então calculado para y_i , o raio da nuvem perigosa.

A equação (37) pode ser usada para dar uma estimativa da área A_h , o qual uma fonte de ignição pode dar origem a uma nuvem de fogo.

CÁLCULO DE FAIXAS E ÁREAS DE PERIGO

A faixa de perigo e área de perigo são encontradas pela primeira resolução da equação (42) para encontrar o raio da nuvem y_j . A distância de propagação lateral y_i , para L_f é então determinada para cada ponto na posição da propagação lateral x_i , :

$$y_i = \max\left(\sqrt{y_j^2 - (x_j - x_i)^2}\right) \quad j=1.....48 \quad (43)$$

na faixa de perigo a favor do vento x_h , é

$$x_h = \max(x_j + y_j) \quad j=1.....48, y_j > 0 \quad (44)$$

A faixa de perigo a favor do vento é então calculada utilizando- se a equação (37) e fazendo-se a somatória de i no lugar de j .

Um cálculo similar é utilizado para determinar a área e a faixa de perigo na ascensão da nuvem.

INTERAÇÃO COM A POPULAÇÃO

Para gases inflamáveis não se calcula como as pessoas podem ser atingidas na área A_h , pois não existem somente pessoas que estão, dentro dessas áreas, sob o risco da combustão, detonação ou deflação da nuvem – ondas de pressão ou nuvens de energia radiante podem afetar pessoas fora dessas áreas.

4.6 CONCLUSÕES

O programa inicial em que foi aplicado esta modelagem foi desenvolvido em uma linguagem que não possibilitava a obtenção de resultados com visualização gráfica. Além disso a entrada dos dados era realizado por meio de cartões perfurados, não possibilitando o uso deste programa em microcomputadores. Neste trabalho, foram desenvolvidas alterações que serão discutidas no próximo capítulo e que possibilitaram a alimentação de dados via teclado de um microcomputador e com a obtenção de resultados na forma gráfica.

CAPÍTULO V – ALTERAÇÕES REALIZADAS

5.1 INTRODUÇÃO

Neste Capítulo são descritas as alterações realizadas no programa inicial, a fim de adaptá-lo para a utilização em microcomputadores, como é realizada a nova rotina de entrada de dados e quais as possibilidades de saída de resultados.

5.2 ALTERAÇÕES REALIZADAS

As principais alterações que foram realizadas no programa inicial, consistiram em desenvolver uma nova rotina de entrada de dados que possibilitou a utilização deste programa em microcomputadores. Neste trabalho foi desenvolvida uma nova rotina para a saída dos resultados, que são apresentados na forma gráfica, e podem ser armazenados em qualquer editor de textos ou impressos diretamente. Na execução do programa, para cada gráfico apresentado no monitor como saída, o programa interrompe a execução e apresenta ao usuário uma barra de opções em que é escolhido o destino do gráfico no monitor. Após esta definição clica-se na barra em “OK” e a execução do programa é retomada.

Este programa pode ser utilizado em qualquer microcomputador que possua o arquivo executável em Fortran instalado.

O desenvolvimento dessa rotina necessitou um estudo detalhado da modelagem, do programa principal e de suas rotinas de cálculos, devido a compatibilidade requerida.

5.3 ENTRADA DE DADOS

A nova rotina de entrada de dados, devido a interatividade com o usuário, possibilitou que fosse realizada via teclado, através de perguntas e informações que aparecem na tela do monitor.

A introdução dos dados é realizada através de palavras chaves. Cada palavra chave refere-se a uma classe de dados específicos. Por exemplo, WEATHER, a esta palavra chave estão relacionados as condições meteorológicas do local do acidente, os dados que devem ser introduzidos são a categoria meteorológica de Pasquill, a velocidade do vento e a probabilidade dos ventos nos setores.

As palavras chaves são classificadas em essenciais e facultativas. As palavras chaves essenciais como o próprio nome diz, são as palavras (dados) que devem ser sempre introduzidas. Caso não sejam introduzidas, aparecerá uma mensagem de erro no monitor e o programa não rodará. As palavras chaves facultativas não necessariamente devem ser fornecidas ao programa, pois neste caso o programa adota os valores padrões armazenados em sua biblioteca. As palavras chaves que podem ser utilizadas na entrada de dados são apresentadas a seguir:

PALAVRAS CHAVES ESSENCIAIS

- HAZARD - entrada de dados referente ao perigo, por exemplo: o número e o tipo de perigo, concentrações e tempo de exposição e limites de explosividade.
- SITE – entrada de dados referente a distribuição da população, por exemplo: o número de raios de distância, de setores e de pessoas.
- GAS – entrada de dados referente ao gás denso, por exemplo: massa, densidade e temperatura.

- AIR – entrada de dados referente ao ar, por exemplo: massa e densidade.
- WEATHER – entrada de dados referentes a categoria meteorológica, por exemplo: o número e as velocidades por categoria e a probabilidade do vento nos setores.

PALAVRAS CHAVES FACULTATIVAS

- HEIGHT – altura da medida das velocidades do vento, caso não seja introduzida o valor de 10 m é utilizado como padrão.
- ROUGHNESS – topografia do solo, caso não seja introduzido o valor de 0,1 m é utilizado.
- CUT_OFF – altura no término da fase de afundamento, caso não seja introduzida um valor de 0,5 m é utilizado
- STAGE_3 – diferença de densidade no término da dispersão da nuvem, caso não seja introduzida o valor de $0,001 \text{ kg/m}^3$ é utilizado.
- AREA – especifica a área da base do cilindro de gás, caso não seja introduzida é calculado a partir do volume, já que o raio do cilindro é assumido igual a altura. O volume é calculado a partir da massa e densidade iniciais.
- HEAT – entrada de dados referentes ao aquecimento da nuvem, por exemplo: Calores específico do ar e do gás, temperatura do ar e do solo, a densidade do gás. Caso não seja introduzida a troca de calor entre a nuvem e o solo não será considerada.
- VAN_ULDEN – Constante K na equação de Van Ulden (equação 2), caso não seja introduzida o valor de um é utilizado.

- ENTRAIN – entrada de dados referentes à entrada de ar, por exemplo: temperatura do ar e do solo, as constantes de proporcionalidade na equação de Cox e Roe (equação 10 e 11), caso não seja introduzida os valores da temperatura do ar e do solo são adotados iguais a 293 K, α^* igual a zero e α' igual a 0,5.

5.4 RESULTADOS DE SAÍDA

Após os cálculos realizados, obtém-se como resultados na saída do programa, para cada classe meteorológica especificada na entrada os seguintes resultados em forma de tabelas:

- Dimensões da nuvem (altura, raio e área);
- Altura, raio e tempo imediatamente após o afundamento;
- Concentrações do gás denso em função da posição, da altura, do raio, tempo de passagem e velocidade da nuvem;
- Posição em função da dispersão a favor do vento e na ascensão da nuvem;
- Área a favor do vento, na ascensão da nuvem e total.
- Velocidade de entrada de ar em função da posição, da temperatura, da densidade da nuvem, da diferença de densidades, da taxa de calor, da massa de ar que entra e do número de Richardson;

Além desses resultados em forma de tabelas, para facilitar a visualização, os resultados obtidos nas tabelas são plotados obtendo-se os seguintes gráficos:

- Altura da nuvem em função da distância a favor do vento;
- Raio da nuvem em função da distância a favor do vento;
- Linhas de isoconcentração em função da distância a favor do vento;
- Distância do ponto de vazamento em função dos diferentes níveis de perigo;
- Tempo a partir do início vazamento em função dos diferentes níveis de perigo.

5.5 CONCLUSÃO

O programa com as novas rotinas apresentadas, possibilitou uma maior interatividade com o usuário e os resultados obtidos na forma gráfica possibilitam uma melhor visualização da simulação de uma análise de um acidente, facilitando a sua interpretação.

Na figura V.1 será descrito como é realizada a entrada de dados. Como já mencionado no capítulo, a alimentação dos dados é realizada por meio de perguntas que surgem no monitor e que devem ser respondidas pelo usuário. A cada pergunta respondida, um dado deverá ser alimentado, surgindo outra pergunta na sequência, assim por diante, até que todos os dados sejam alimentados.

Figura V.1: Planilha de entrada de dados

- Que tipo de dados serão alimentados? HAZARD
- Digite o número de dados de concentração perigosa x tempo de exposição que serão alimentados? _____
- Concentração perigosa (kg/m^3)? _____
- Tempo de exposição (s)? _____

- Que tipo de dados serão alimentados? SITE
- Digite o número de raios? _____
- Digite o número de setores em cada raio? _____
- Digite o número de pessoas para o raio 1 setor 1? _____
- Digite o número de pessoas para o raio 1 setor 2? _____

- Que tipo de dados serão alimentados? WEATHER
- Digite o número de velocidades de vento por categoria meteorológica?
- Categoria A _____
- Categoria B _____
- Categoria C _____
- Categoria D _____
- Categoria E _____
- Categoria F _____
- Digite as velocidades do vento para a categoria “escolhida”?

- Que tipo de dados serão alimentados? GAS
- Massa de gás denso que vazou (kg)? _____
- Densidade inicial do gás (kg/m^3)? _____
- Temperatura da mistura (K)? _____

- Que tipo de dados serão alimentados? AIR
- Digite a massa de ar no cilindro (kg)? _____
- Densidade do ar (kg/m^3) a temperatura ambiente?

CAPITULO VI - APLICAÇÃO DO PROGRAMA

6.1 INTRODUÇÃO

Neste Capítulo serão apresentado dois casos de aplicação do programa desenvolvido. No caso 1, desenvolvido por Fryer e Kaiser [FRYER & KAISER-1979], os resultados obtidos após a execução do programa serão comentados. No caso 2, compara-se os resultados obtidos pelo programa desenvolvido neste trabalho, com os resultados obtidos [MARIN-1999], a partir de um programa comercial, WHAZAN, descrito no anexo 1.

6.2 CASO 1:

Vazamento catastrófico em um acidente rodoviário de um caminhão que transportava amônia

- Quantidade de Amônia vazada: 40 toneladas
- Concentração de perigo utilizada: Os valores foram expressos em uma curva, contendo quatro valores, concentração versus tempo de exposição. Os valores de concentração são: 7×10^{-3} , $3,5 \times 10^{-3}$, $1,2 \times 10^{-3}$, 5×10^{-4} kg/m³, e os respectivos tempos de exposição são: 300, 900, 1800, 3600 s.
- Condições meteorológicas: deve-se simular o vazamento ocorrendo em categoria D de Pasquill considerando velocidades do vento de 3 m/s e 9 m/s e em categoria F de Pasquill considerando velocidade do vento 2 m/s

- Distribuição da população no local: distribuídas em 2 subsetores ocupando 10 raios (50, 100, 150, 200, 300, 400, 500, 600, 700 e 800) metros do acidente com uma pessoa em cada distância a cada setor
- Deve-se assumir que 40 toneladas de amônia durante o vazamento misturam-se com 800 toneladas de ar com uma densidade de $1,2 \text{ kg/m}^3$ obtendo-se a formação de um cilindro com densidade da mistura igual a $1,42 \text{ kg/m}^3$ a 240K.

Para condição meteorológica F com velocidade do vento igual a 2 m/s, os resultados são apresentados nas Figuras VI.1, VI.2, VI.3, VI.4 e VI.5.

Figura VI.1: Altura da nuvem x Downwind

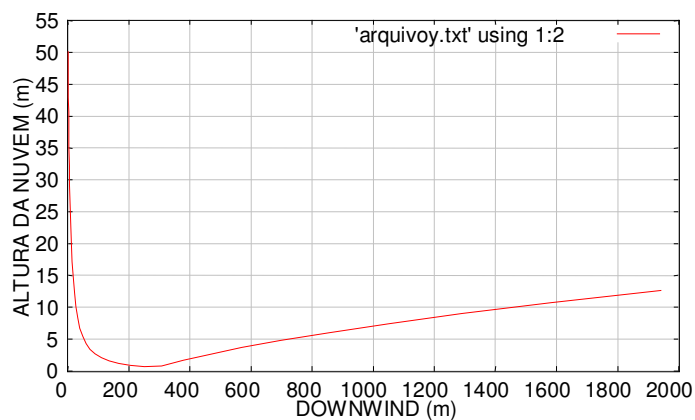


Figura VI.2 Raio x Downwind

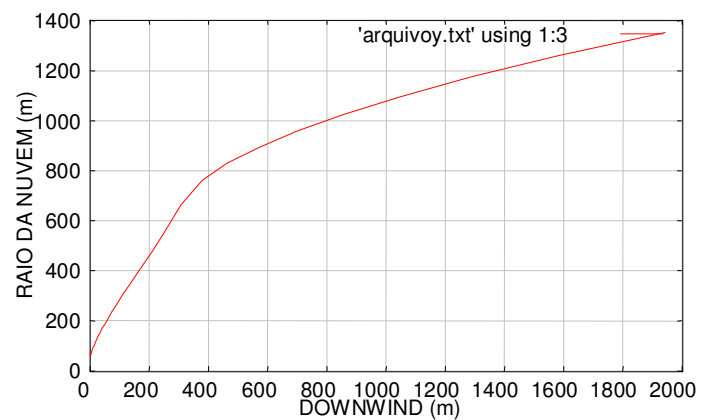


Figura VI.3: Concentração x Tempo

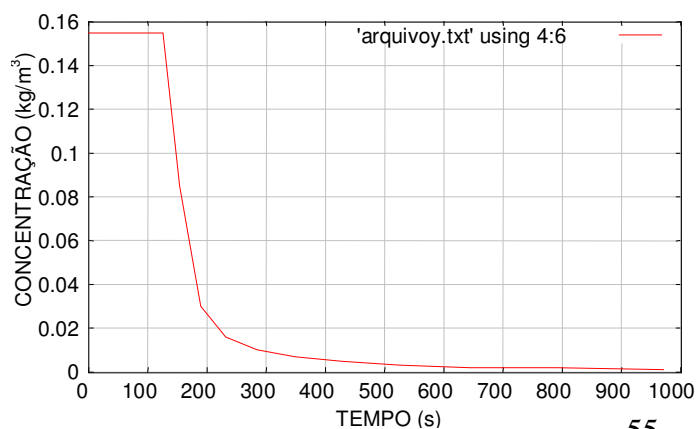


Figura VI.4: Concentração x Downwind

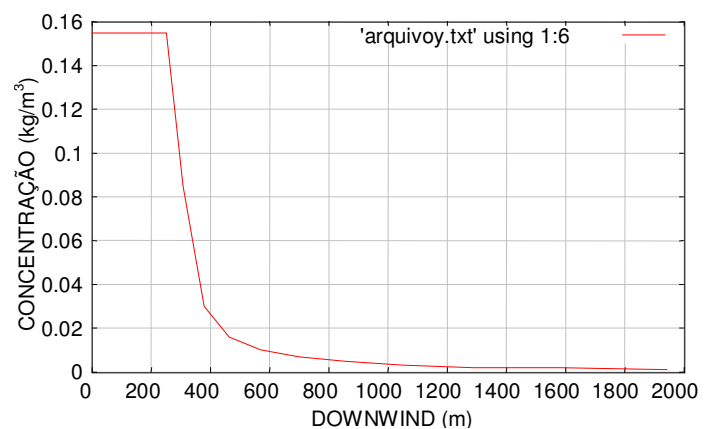
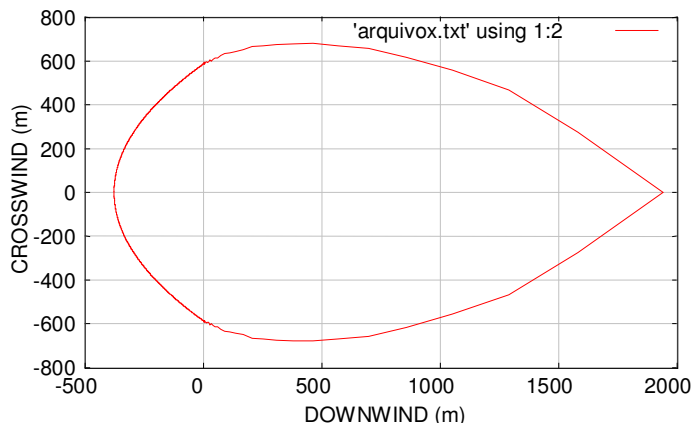


Figura VI.5: Crosswind x Downwind



Para as condições meteorológicas, de Pasquill, D com velocidade do vento igual a 9 m/s, os resultados são apresentados nas Figuras VI.6, VI.7, VI.8, VI.9 e VI.10.

Figura VI.6: Altura da nuvem x Downwind

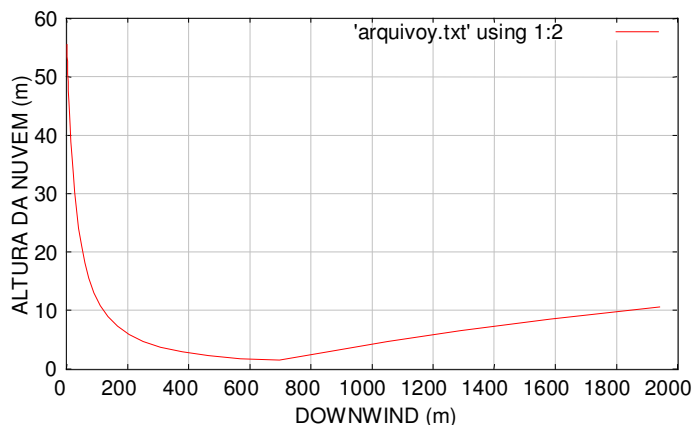


Figura VI.7: Raio x Downwind

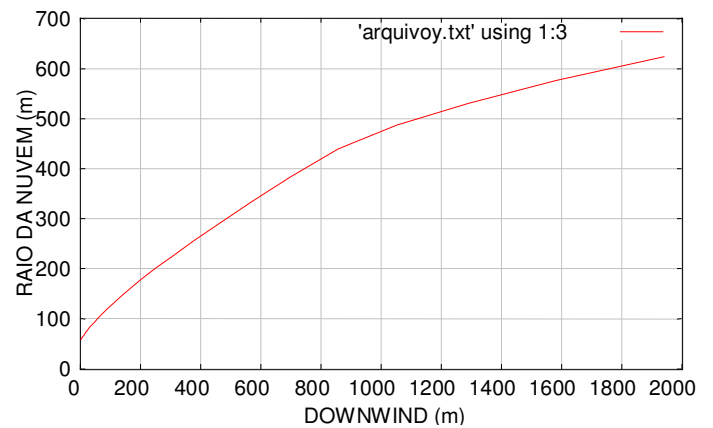


Figura VI.8: Concentração x Tempo Downwind

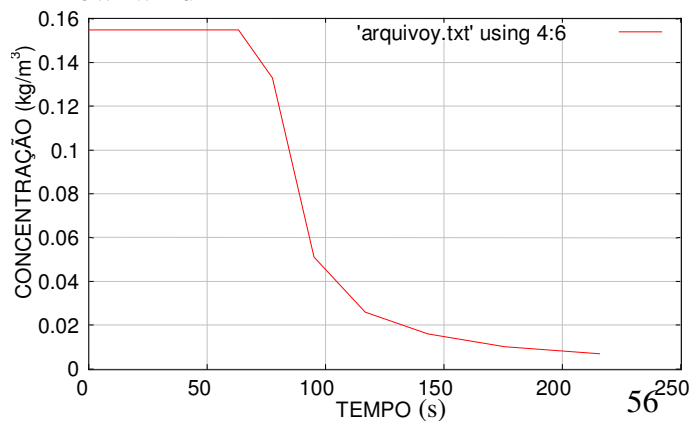


Figura VI.9: Concentração x Downwind

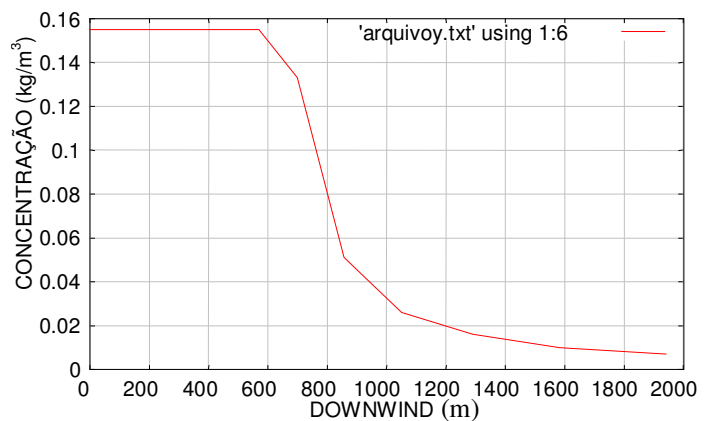
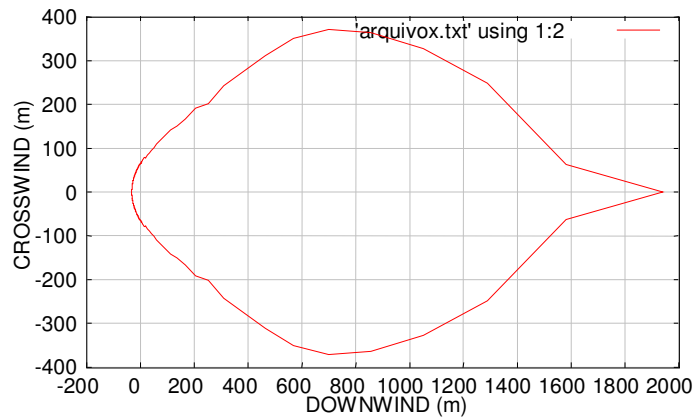


Figura VI.10: Crosswind x Downwind



Para condição meteorológica D com velocidade do vento igual a 3 m/s, os resultados são apresentados nas Figuras VI.11, VI.12, VI.13, VI.14 e VI.15.

Figura VI.11: Altura da nuvem x Downwind

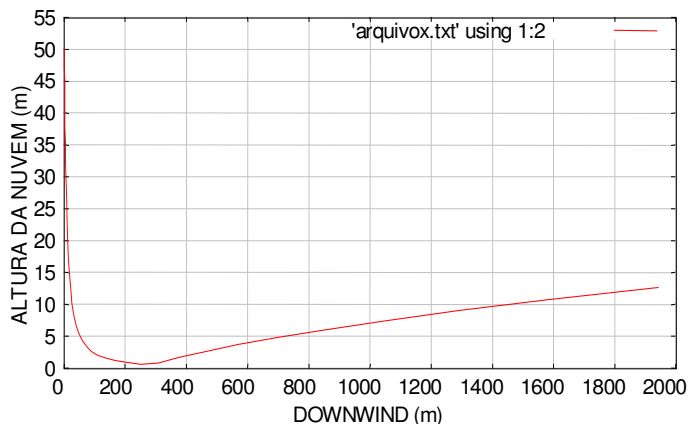


Figura VI.12: Raio x Downwind

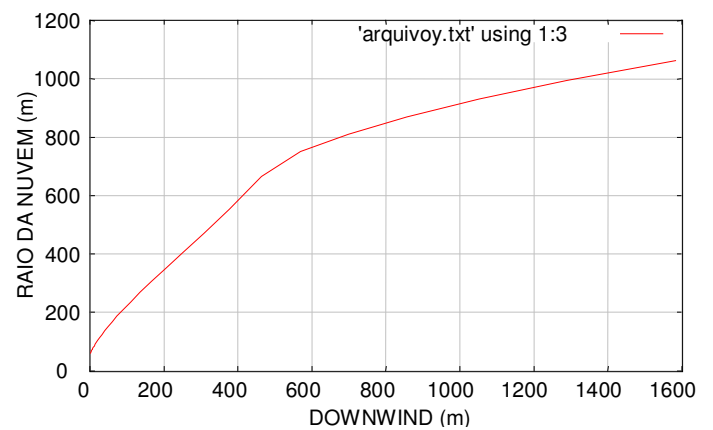


Figura VI.13: Concentração x Tempo

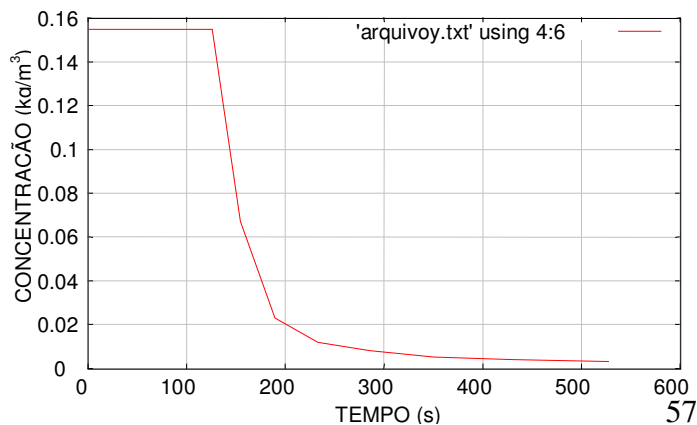


Figura VI.14: Concentração x Downwind

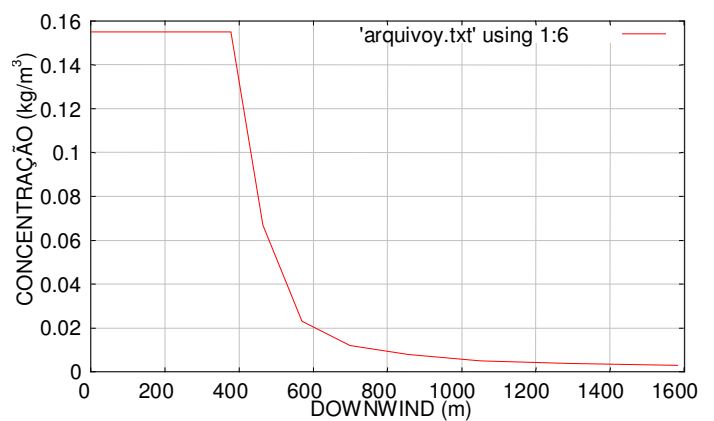
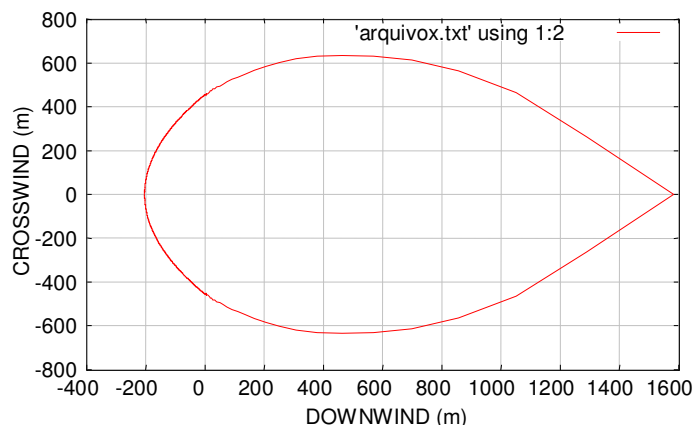


Figura VI.15: Crosswind x Downwind



6.3 COMENTÁRIOS DOS RESULTADOS DO CASO 1

Na Figura VI.1 pode-se observar que a altura inicial da nuvem é de aproximadamente 55m e que ao atingir praticamente 300 m na direção do vento (downwind) a altura da nuvem diminui para aproximadamente 1m, o que caracteriza o fenômeno do afundamento gravitacional. Após o afundamento tem-se a dispersão da nuvem passiva, o que é verificado pelo lento aumento na altura da nuvem a partir dos 200 m na direção do vento.

Observa-se na Figura VI.2 que o raio inicial da nuvem é de aproximadamente 50 m e que este raio aumenta para 400 m ao atingir praticamente 300 m na direção do vento. Este aumento do raio da nuvem é devido ao fenômeno do afundamento, pois com o desabamento do cilindro o seu raio aumenta rapidamente. A partir deste ponto, o aumento do raio é menor o que caracteriza a dispersão da nuvem passiva.

A concentração inicial da amônia na nuvem é de aproximadamente $0,16 \text{ kg/m}^3$, conforme observado na Figura VI.3, e que decorrido 150 s tem-se o início da redução da concentração de Amônia a qual diminui rapidamente até $0,03 \text{ kg/m}^3$, esta redução de concentração é característica do fenômeno do afundamento, que durante o desabamento do cilindro, ocorre intensa entrada de ar reduzindo a concentração de Amônia. Após o afundamento, verifica-se uma redução mais lenta na concentração da Amônia devido a dispersão da nuvem.

Observando-se a Figura VI.4 confirma-se a análise descrita no parágrafo anterior, Figura VI.3, onde é verificado que o afundamento ocorre a 400 m na direção do vento. Além disso após o afundamento verifica-se a redução lenta e gradual da concentração da Amônia durante o fenômeno da dispersão da nuvem passiva.

A área da nuvem tóxica, é mostrada na Figura VI.5. Nesta região a concentração da Amônia está acima de $0,01 \text{ kg/m}^3$, que corresponde a uma concentração mínima de aproximadamente 1400 ppm. Conforme a Tabela II.2, esta concentração é suficiente para a imediata irritação grave dos olhos, nariz e garganta podendo ser fatal após 309 minutos de exposição.

Para as condições meteorológicas D, com velocidades do vento de 9 m/s e 3 m/s as interpretações das Figuras VI.6 a VI.10 e das Figuras VI.11 a VI.15 respectivamente são análogas as descritas para as Figuras VI.1 a VI.5 para as condições meteorológicas F com velocidade do vento de 2 m/s.

Analisando-se todas as figuras apresentadas, pode-se observar que apesar da classe D (classe neutra) favorecer mais a dispersão da nuvem tóxica de gás do que a classe F (classe estável) esta mantém a concentração inicial da Amônia por uma distância maior, isto é devido ao deslocamento do cilindro de gás formado, por meio da velocidade do vento. Após o afundamento observa-se que tem início a dispersão da Amônia (pluma passiva) que provoca uma diminuição na concentração deste gás, esta redução na concentração é mais rápida para a classe D do que para a classe F, e ainda mais rápida quanto maior a velocidade do vento na mesma classe.

Observa-se nas Figuras VI.5, VI.10 e VI.15 que a área tóxica é maior para a classe F, pois devido a grande estabilidade atmosférica, e a menor velocidade do vento, apresenta maior dificuldade de dispersão da nuvem tóxica gasosa.

6.4 CASO 2

Este caso foi analisado a fim de se comparar os resultados obtidos com este programa e um programa comercial (Whazan). A simulação foi realizada nas seguintes condições [MARIN-1999]:

- Quantidade de Amônia vazada: 200 toneladas
- Concentração de perigo utilizada: 200 ppm (ERPG-2)
- Condições meteorológicas: deve-se simular o vazamento ocorrendo em categoria D de Pasquill considerando velocidades do vento de 3 m/s e em categoria F de Pasquill considerando velocidade do vento 1 m/s

- Deve-se assumir que o fator de diluição durante a formação do cilindro é de 60 vezes a quantidade vazada de amônia e que a densidade do ar é de $1,2 \text{ kg/m}^3$ obtendo-se a formação de um cilindro com densidade da mistura igual a $1,42 \text{ kg/m}^3$ a 240K.

Os resultados obtidos serão apresentados da seguinte forma: as Figuras VI.16 e VI.18, referentes às condições meteorológicas F com velocidade do vento de 1 m/s e D com velocidade do vento de 3 m/s respectivamente, foram obtidas por meio da simulação do programa desenvolvido neste trabalho, enquanto que as Figuras VI.17 e VI.19, referentes as condições meteorológicas F com velocidade do vento de 1 m/s e D com velocidade do vento de 3 m/s respectivamente, foram obtidas por meio da simulação do programa comercial, WHAZAN, obtido da literatura [MARIN-1999].

Figura VI.16: Crosswind x Downwind

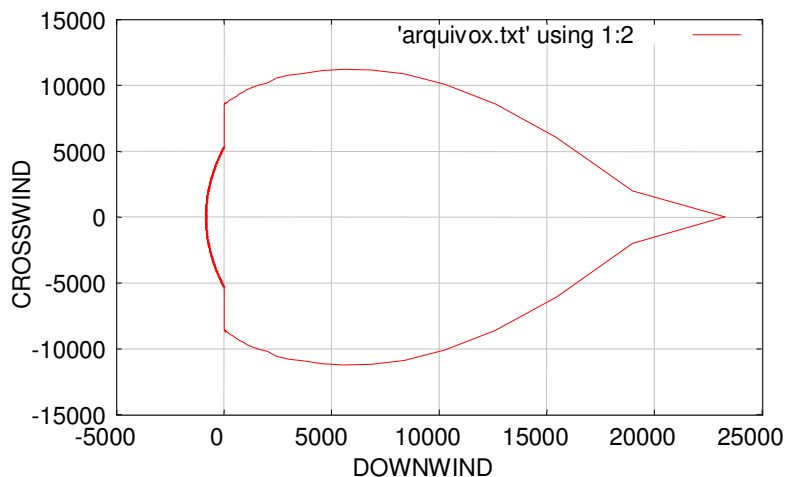


Figura IV.17: Crosswind x Downwind (WHAZAN)

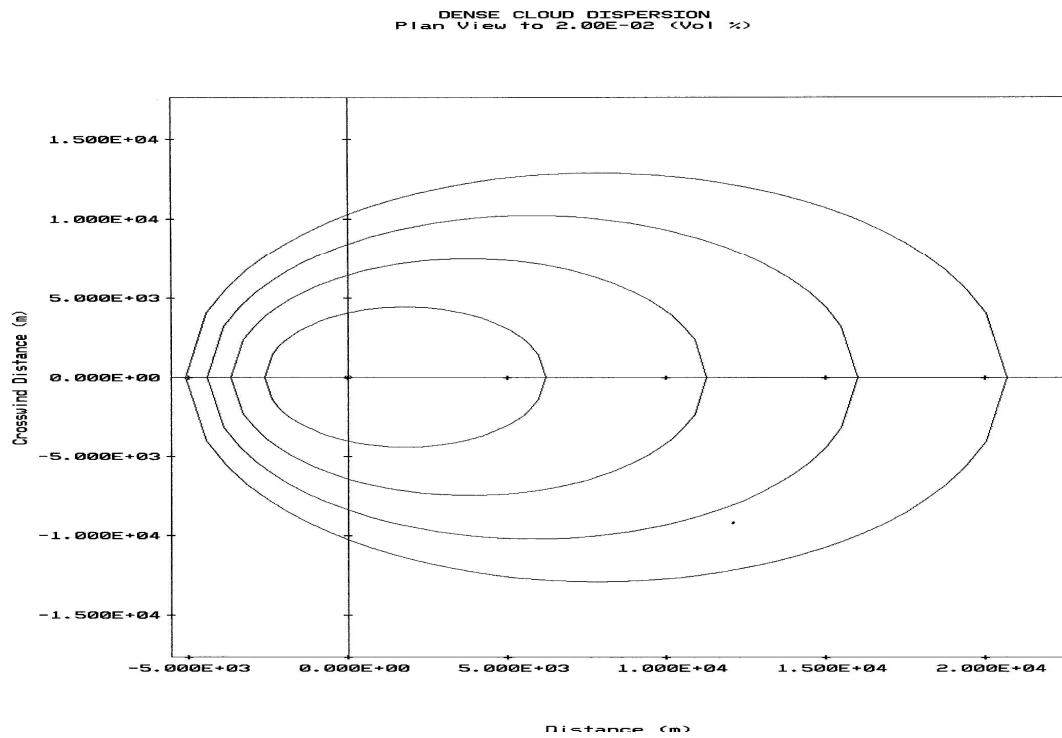


Figura VI.18: Crosswind x Downwind

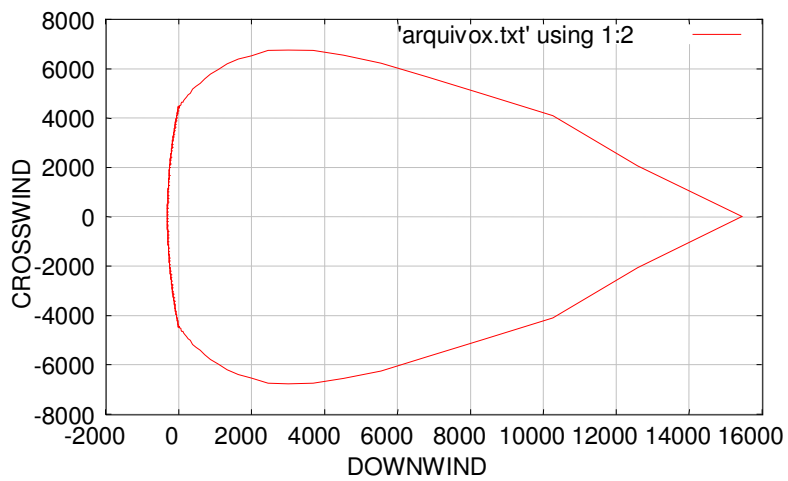
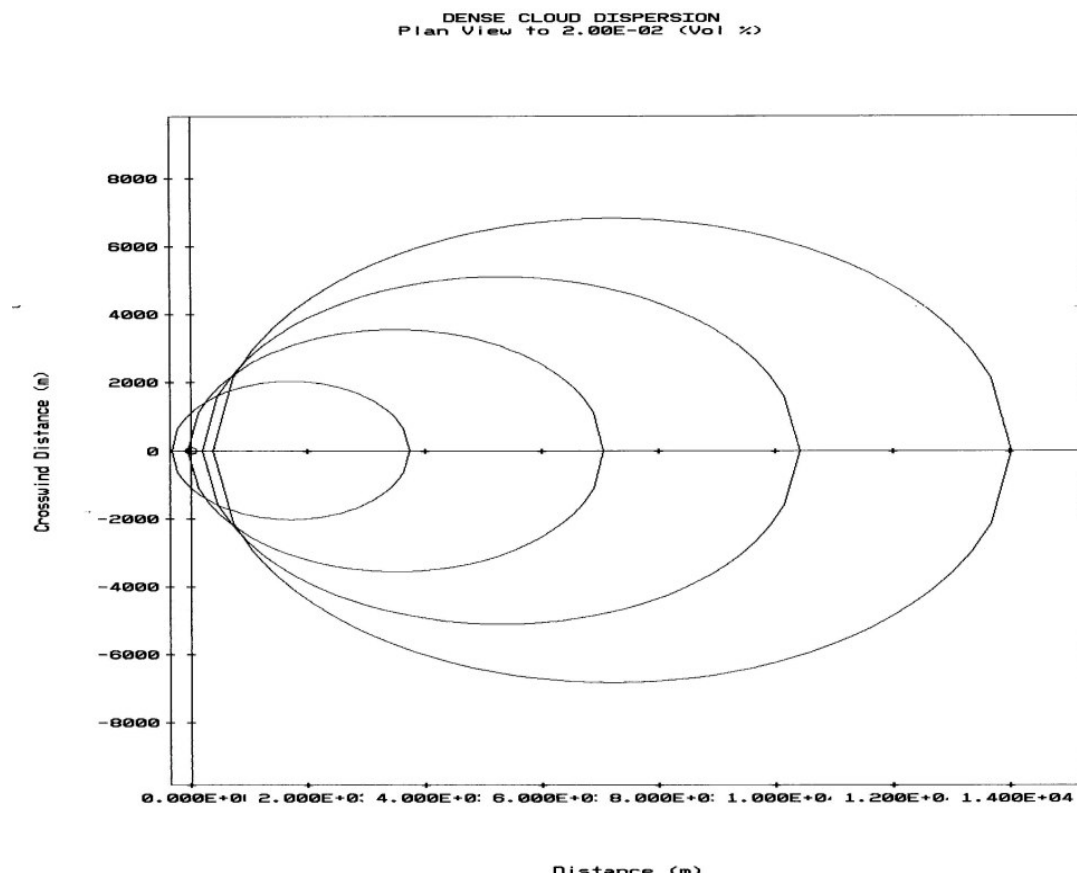


Figura VI.19: Crosswind x Downwind (WHAZAN)



6.5 COMENTÁRIOS DOS RESULTADOS DO CASO 2

Observando-se as Figuras VI.16 e VI.17 para a classe F e as Figuras VI.18 e VI.19 para a classe D pode-se verificar que os resultados obtidos por meio do programa desenvolvido e do programa comercial são bastante próximos quanto a área da nuvem tóxica com concentração de 200 ppm, apesar das curvas obtidas apresentarem pequenas diferenças. Para uma melhor visualização será apresentado na Tabela VI.1 as condições de contorno máximas e mínimas para cada caso.

Tabela VI.1: Comparação entre os resultados obtidos

CONDIÇÕES DE CONTORNO	CLASSE F (1 m/s)		CLASSE D (2 m/s)	
	PROGRAMA DESENVOLVIDO	WHAZAN	PROGRAMA DESENVOLVIDO	WHAZAN
Crosswind máximo (m)	12.000	12.000	7.000	7.000
Crosswind mínimo (m)	12.000	12.000	7.000	7.000
Downwind máximo (m)	22.000	22.000	15.000	14.000
Downwind mínimo (m)	2.000	4.000	500	500

O programa desenvolvido neste trabalho pôde ser validado, tendo em vista que os resultados obtidos estarem muito próximos dos resultados obtidos pelo programa comercial (WHAZAN)

CAPITULO VII – CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

7.1 CONCLUSÕES

Os resultados obtidos na simulação do caso 1, estão de acordo com os resultados apresentados na literatura consultada, com a vantagem de serem apresentados de forma gráfica o que facilita a visualização enquanto que na literatura consultada os dados são apresentados em forma de tabelas.

Comparando-se os resultados obtidos na simulação com este programa, com os obtidos utilizando-se o programa comercial, verifica-se a convergência de resultados, quanto as dimensões da nuvem e sua propagação.

O programa desenvolvido tem grande aplicabilidade na simulação de na análise de riscos para vazamentos catastróficos de gases mais densos que o ar, tendo em vista que o programa comercial apresenta alto custo.

7.2 RECOMENDAÇÕES

Para próximo trabalho, sugere-se que seja desenvolvido um programa complementar para simulação de análise de riscos para substâncias menos densas que o ar (dispersão passiva), o que deixaria este programa completo e similar aos programas comerciais.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

AICHE: American Institute of Chemical Engineers; Ammonia Safety Plant, 27, 1986.

AIHA: American Industrial Hygiene Association, “Concepts and Procedures for Development of Emergency Response Planning Guideline (ERPGs)”, 1989.

ACGIH: American Conference of Governmental Industrial Hygienists , “Threshold Limit Values and Biological Exposure Indices for 1989-1990”, Ohio, 1989

ARTINGSTALL. G. .Displacement of gas from a ruptured container and its dispersal in the atmosphere. Safety in Mines Research Establishment (Sheffield). Artigo apresentado no Fourth Symposium on Chemical Process Hazards Chem. Ing. Tech. 56 (1984) n°4 A 154

BRISCOE. F. Preliminary analysis of the fire and explosion incident at the Los Alfraques Camp Site on 11 July 1978. SRD Internal Note (1978)

CANVEY: An investigation of potential hazards from operations in the Canvey Island/Thurrock Area. Her Majesty's Stationery Office, London (1975)

FRYER, L.S; KAISER, G.D;Dispersion of dense toxic or explosive gases in the atmosphere; United Kingdom Atomic Energy Authority Safety and Reability Directorate, SRD R 152 (1979)

GIFFORD. F. A. , A review of turbulent diffusion typing schemes'. Nuclear Safety, 17. (1976) pp.686

GRIFFITHS. R. F. Observations of non-buoyant behaviour of ammonia following accidental discharges to the atmosphere. Publicado como anexo (intitulado Ammonia

Release Incidents) no apendice 4

KAISER, G. D. e WALKER, B. C. .Releases of anhydrous ammonia from pressurised containers - the importance of denser-than-air mixtures. Atmospheric Environment. 12 (1978) pp.2289-2300

KHARLAMOV, V. V.,TSYMBAL Y. M. Zh. Uses. Khim. Ova. 28 (1983) n°4, 433-438

HADDOCK. S. R. and WILLIAMS. R. J. The density of an ammonia cloud in the early stages of its atmospheric dispersion. UKAEA Report SRD R103 (1978)

HALE, C. C. American Institute of Chemical Engineers;Ammonia Safety Plant, 16 (1974) 23

HALE, C. C. Nitrogen (1979) n° 119, 30-36

HALE, C. C. American Institute of Chemical Engineers;Ammonia Safety Plant, 21 1979) 61

HALE, C. C. Nitrogen (1980) n° 125, 1-5

HALE, C. C. American Institute of Chemical Engineers; Ammonia Safety Plant, 24 (1984) 181

HALL. D. J. .Further experiments on a model of an escape of heavy gas. Laboratory Report CR 1314 (AP) (1977)

HUBENICK, T. Plant Oper. Prog. (1982) n° 2, 117-122

HAVENS, J. A. Predictability of LNG vapour dispersion from catastrophic spills on to water. University of Arkansas Report AD-A040-525 (1977)

LONSDALE. H. 'Ammonia tank failure - South Africa'. Ammonia Plant Safety, 17. (1975).pp.126-131

MARIN, M. P. A; Análise de perigos em uma instalação de produção de Hexafluoreto de urânio, São Paulo: Instituto de pesquisas energéticas e nucleares, Universidade de São Paulo, 1999. P173. Dissertação (mestrado)

McADAMS, W. H. Heat transmission. McGraw-Hill, New York (1954)

McMULLEN, G. A review of the 11th May ammonia truck accident. City of Houston Health Department Report (unnumbered). (1976)

MILLER, A. Kaelte (Hamburg) 20 (1967) n° 6, 275

NIOSH Pocket Guide to Chemical Hazards; HHS Publication, 1985.

OEZVEGYI, F. Kaelte (Hamburg) 23 (1970) n° 6, 298

PASQUILL, F. The estimation of the dispersion of windborne material. Met. Mag. 90 (1961) pp.33

PICKNETT R. G. et al. 'Field experiments on the behaviour of dense clouds. Report. (1978).

RAR: Railroad Accident Report: Louisville and Nashville Railroad Company freight train derailment and puncture of anhydrous ammonia tank cars at Pensacola, Florida, 9 November 1977. US National Transportation Safety Board Report Number NTSB-RAR-78-4 (1978)

TAYLOR, R. J., WARNER, J. e BACON, N. E. Scale length in atmospheric turbulence as measured from an aircraft. Quart. J. R. Met. Soc. 96 (1970) pp.750

VAN ULDEN. A. P. .On the spreading of a heavy gas released near the ground. Loss Prevention Symposium. The Netherlands. May 1974. Elsevier, Editor C. H. Buschmann. pp.221-226

WHO: World Health Organization; Ammonia: Health and Safety Guide; Geneva, 1990.

WAKABAYASHI, T. Ammonia Plant Saf. 20 (1978) 17

ANEXO I - PROGRAMA COMPUTACIONAL WHAZAN

WHAZAN é um programa de computador desenvolvido pela “Técnica International Ltd” em colaboração com o Banco Mundial, que permite ao usuário efetuar uma rápida estimativa das prováveis consequências resultantes de uma liberação acidental de substâncias (líquidas ou gasosas) tóxicas / e ou inflamáveis.

O programa contém uma série de modelos de consequências, associadas a dados básicos incluindo valores de certas propriedades importantes de várias substâncias químicas perigosas. Os modelos de consequências podem ser executados individualmente ou podem ser associados a resultados de um outro modelo, o qual pode ser automaticamente transferido tornando-se dado de entrada para o próximo modelo.

Os modelos abrangem as seguintes áreas :

liberação de substâncias químicas;
comportamento imediatamente após a liberação;
dispersão na atmosfera; e
incêndios e explosões.